



Universidad
Carlos III de Madrid

TESIS DOCTORAL

Modelo y Simulación Numérica del Transporte Electrónico en Superredes Semiconductoras en un Campo Magnético Externo

Autor:

Andrés Segura Aragonés

Directores:

Luis Francisco López Bonilla

Manuel Carretero Cerrajero

Instituto Gregorio Millán Barbany

**Grupo de Modelización, Simulación Numérica y
Matemática Industrial**

Leganés, Octubre de 2016

TESIS DOCTORAL

Modelo y Simulación Numérica del Transporte Electrónico en Superredes Semiconductoras en un Campo Magnético Externo

Autor: Andrés Segura Aragonés

Directores: Luis Francisco López Bonilla y Manuel Carretero Cerrajero

Firma del tribunal calificador:

(Nombre y Apellidos)

Firma

Presidente:

Vocal:

Secretario:

Calificación:

Leganés, de de

A mi familia

Agradecimientos

El primer y el más sincero agradecimiento es para mis directores de tesis Luis L. Bonilla y Manuel Carretero por su confianza al incluirme en su proyecto de investigación, su dedicación y sus sugerencias durante la realización de esta tesis. Doy las gracias también al Grupo de Modelización, Simulación Numérica y Matemática Industrial, así como al Departamento de Ciencia e Ingeniería de Materiales e Ingeniería Química, por los medios materiales y humanos de los que he disfrutado durante el tiempo de elaboración de la tesis. Finalmente, quiero agradecer a los miembros del tribunal que han accedido a formar parte de éste.

Índice

1	Introducción	1
2	Conceptos generales	5
2.1	Conceptos generales de la teoría semiclásica del movimiento electrónico	5
2.1.1	Ecuación de Schrödinger en un potencial periódico y teoría de bandas	7
2.2	El dispositivo físico	11
2.3	Transporte por minibanda	13
2.3.1	Oscilaciones de Bloch y oscilaciones ciclotrónicas	16
3	Estudios previos sobre la superred GaAs/AlAs/InAs	19
3.1	Estudios experimentales	21
3.2	Estudios teóricos	22
3.2.1	Modelo semiclásico	23
3.2.2	Scattering y cálculo de la velocidad <i>drift</i>	24
3.2.3	Modelo para el transporte de carga	27
4	Descripción del modelo	31
4.1	Ecuaciones BGK	32
4.2	Transformaciones en la función de distribución	36
4.2.1	Densidades de corriente y ecuaciones de los momentos .	36
4.3	Balance dominante	38
4.4	Orden principal de la función de distribución f	40
4.5	Orden principal de la densidad de corriente	43
4.6	Términos a primer orden	44
4.6.1	Cálculo de la densidad de corriente $J_{nx}^{(1)}$	45
4.6.2	Cálculo de la densidad de corriente $J_{nz}^{(1)}$	48
4.7	Dominio y ecuaciones diferenciales con dimensiones	51

4.7.1	Adimensionalización del modelo	53
5	Método de Volúmenes Finitos para la descripción del transporte electrónico	57
5.1	Configuración unidimensional	58
5.1.1	FVM 1D para el modelo a orden principal	59
5.1.2	FVM 1D para ecuaciones convectivo-difusivas	69
5.1.3	FVM 1D para el modelo a primer orden	71
5.2	Esquema 2D	81
5.2.1	Ecuaciones adimensionales del problema 2D: modelo convectivo	82
5.2.2	Integración numérica del modelo convectivo	83
5.2.3	Malla no uniforme y resolución numérica de la ecuación de Poisson	84
5.2.4	Resolución de la ecuación de transporte mediante Upwind Differencing FVM Implícito	85
6	Resultados numéricos	97
6.1	Campos magnéticos bajos	100
6.2	Campos magnéticos altos	102
6.2.1	Tasas de colisión	103
6.3	Oscilaciones estacionarias de la corriente	105
7	Conclusiones Generales	113
A	Adimensionalización de las ecuaciones	115
A.1	Ecuación de Poisson	115
A.2	Ecuación de transporte	116
A.3	Ecuaciones de Ampère	116
A.4	Ecuación de la divergencia nula	117
A.5	Dominio de integración de las ecuaciones	117
A.6	Condiciones de contorno	117
A.7	Relación constitutiva J_{nz}	119
A.8	Relación constitutiva J_{nx}	120
	Bibliografía	125

Capítulo 1

Introducción

Una superred (SL en sus siglas en inglés) es un cristal artificial que tiene una estructura periódica de capas de dos o más materiales semiconductores, donde el espesor de cada una de las capas es de varios nanómetros. Como las energías de las bandas de conducción y de valencia así como el gap entre ellas son diferentes para los dos cristales, las bandas de la red se comportan como una sucesión periódica de pozos y barreras. Esta estructura proporciona un potencial periódico para la conducción de electrones. Además, el dispositivo se somete bajo la influencia de un campo magnético oblicuo respecto al eje de crecimiento de los pozos cuánticos. Cuando se aplica un voltaje en los contactos de la SL se genera un movimiento electrónico el cual puede conducir a dominios estáticos o viajeros de la densidad de carga y a oscilaciones autosostenidas de la corriente, entre otros. Estos fenómenos tienen aplicabilidad práctica, ya que por ejemplo este tipo de nanoestructuras pueden ser utilizados como detectores sintonizables de altas frecuencias.

En cuanto al estudio teórico, usando la función de distribución electrónica, solución de la ecuación cinética, se puede obtener información del sistema tal como la densidad electrónica o el flujo electrónico. La ecuación cinética será de tipo Boltzmann con tratamiento de colisiones mediante términos de tipo BGK (Bhatnagar, Gross y Krook) [1] y estará acoplada a la ecuación de Poisson para el potencial eléctrico con el fin de incluir los efectos espaciales de la carga, tal y como se describió por Bonilla et al en [2]. Debido a la acción de un campo magnético externo, la dinámica del transporte electrónico tiene carácter bidimensional (salvo que el campo magnético esté en posición perpendicular a la dirección de crecimiento de la SL, lo que proporciona una dinámica electrónica unidimensional). La resolución numérica del sistema de ecuaciones Boltzmann-Poisson es muy costosa computacionalmente, por lo que se utilizará una descripción más simple proveniente de considerar que los

términos de colisiones y del campo eléctrico dominan a los demás términos en la ecuación cinética. Un método de perturbaciones singulares permitirá derivar un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales cuya resolución será numéricamente abordable y de donde se podrá obtener el potencial eléctrico y la densidad electrónica. A partir de estas dos variables se podrá componer la dinámica electrónica del sistema, la cual dependerá del ángulo de inclinación del campo magnético respecto de la dirección de crecimiento de la SL, de la intensidad de dicho campo y del voltaje aplicado.

Nuestro objetivo en esta tesis ha consistido en, una vez descrito el sistema Boltzmann-Poisson y obtenida la derivación de las ecuaciones diferenciales bidimensionales a partir de la ecuación cinética, el desarrollo de un método numérico optimizado basado en volúmenes finitos capaz de capturar los fenómenos no lineales del transporte electrónico en superredes semiconductoras fuertemente acopladas bajo la influencia de un campo magnético.

El contenido de esta tesis se estructura en tres partes. Los capítulos 2 y 3 explican de manera resumida algunos conceptos generales de la teoría de semiconductores, muestran una breve descripción de la composición de la nanoestructura estudiada en esta memoria y describen otros trabajos relacionados con dicha SL. En el capítulo 4 se describe detalladamente el modelo matemático y se presentan las ecuaciones a integrar. En los capítulos 5 y 6 se desarrolla el esquema numérico y se presentan los resultados. A continuación mostramos de manera más detallada los capítulos.

En el capítulo 2 explicamos de manera muy resumida los conceptos generales de la teoría semiclásica que fundamentan la teoría de semiconductores. Posteriormente se describe la superred específica tratada en este trabajo explicando los parámetros físicos que la conforman. El capítulo continúa describiendo el transporte por minibanda mediante el sistema semiclásico del movimiento del electrón, en el cual no se tiene en cuenta todavía los efectos de colisión o *scattering*, y las frecuencias de Bloch y ciclotrónicas.

En el capítulo 3 se recopilan trabajos científicos relacionados directamente con la superred descrita en el capítulo anterior. Estos estudios se dividen en dos: experimentales y teóricos. Experimentalmente el dispositivo se somete a altas intensidades magnéticas donde se muestran mediciones de la característica corriente-voltaje $I(V)$. En cuanto a los estudios teóricos, en ellos se infiere un modelo unidimensional para la descripción del comportamiento cualitativo del transporte electrónico de la superred. Primero se deducen las ecuaciones semiclásicas del movimiento del electrón partiendo de un campo eléctrico unidimensional y de éstas se deriva la ecuación del oscilador armónico forzado. Para añadir el efecto de *scattering* se usa una velocidad drift v_d para los electrones generalizando la formulación del modelo de Esaki-

Tsu. Finalmente se toman en cuenta unas ecuaciones de continuidad de la corriente y de Poisson para una descripción unidimensional de la dinámica electrónica.

El capítulo 4 contiene la derivación del modelo bidimensional que se utilizará en esta tesis. A partir de este modelo se obtienen las ecuaciones diferenciales a integrar numéricamente. Se supondrá en la ecuación cinética del sistema acoplado Boltzmann-Poisson que los términos de colisión y de campo eléctrico son comparables y dominantes al resto de los términos, de lo que se obtendrá un parámetro pequeño. Se aplicará, por lo tanto, el método perturbativo de Chapman-Enskog del que se obtendrá una aproximación a la función de distribución. Así se podrá establecer la ecuación del momento para la densidad electrónica donde una de las variables dependientes es la densidad de corriente que depende directamente de la función de distribución. Dicha ecuación de transporte será de tipo puramente convectiva. El problema quedará definido teniendo en cuenta el acoplamiento de la ecuación de Poisson y unas condiciones de contorno adecuadas.

El capítulo 5 consta del esquema numérico empleado para integrar la ecuación de transporte. El método de los volúmenes finitos aprovecha que la ecuación y sus condiciones de contorno dependen de las densidades de corriente, i.e., de los flujos *electrónicos*. Primero el esquema se implementará en una versión unidimensional del problema que surge de considerar el campo magnético perpendicular al eje de crecimiento de los pozos cuánticos. Del problema unidimensional se obtendrán dos versiones: una convectiva que surge de considerar solo el orden principal en la expansión de la función de distribución y otra versión convectiva-difusiva proveniente de considerar hasta el primer orden en dicha expansión. Además se detalla la implementación 2D del esquema numérico al problema bidimensional donde se hará variar el ángulo entre el campo magnético y el eje de crecimiento de los pozos.

En el capítulo 6 se muestran los resultados numéricos para el caso bidimensional, los cuales a partir de un valor crítico de la intensidad magnética exhibirán un confinamiento electrónico en el que se formará un canal estrecho de densidad de carga entre los contactos. La inclinación del canal dependerá del ángulo del campo magnético y la anchura de su intensidad. Se encontrará un rango de valores del voltaje aplicado mostrando en los resultados oscilaciones autosostenidas de la corriente.

Por último, en el capítulo 7 se resume las conclusiones de la presente memoria donde se describen las posibles líneas de trabajo que se pueden seguir a partir del estudio realizado.

Capítulo 2

Conceptos generales

A lo largo de los siguientes apartados de este capítulo se hará una revisión de los aspectos más importantes que fundamentan la teoría de los semiconductores, así como una descripción del dispositivo físico estudiado en esta tesis. La intención de este capítulo es relacionar dicha teoría con el dispositivo que vamos a analizar.

2.1 Conceptos generales de la teoría semiclásica del movimiento electrónico

La energía total de un sistema es la suma de la energía cinética y la potencial

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\underline{r}), \quad (2.1)$$

a partir de lo cual podemos escribir la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\underline{r}) \Psi, \quad (2.2)$$

donde Ψ es la función de onda, $\underline{r} = (x, y, z)$ es el vector posición, \hbar es la constante de Planck reducida, m la masa efectiva de la partícula, V la energía potencial y t la variable temporal.

La función de onda (o de estado) $\Psi(\underline{r}, t)$ contiene toda la información medible de cada partícula del sistema [3]. A fin de construir un puente entre los estados y las medidas, se desarrolla la noción de operador (ver tabla (2.1)).

Un operador actuando sobre la función de estado Ψ puede producir una ecuación lineal homogénea $\hat{y} \Psi = y \Psi$, donde $y \in \mathbb{R}$ es el valor propio del

Variable dinámica	Operador cuántico
Posición \underline{r}	$\hat{\underline{r}} \equiv \underline{r}$
Momento $p_{\underline{r}}$	$\hat{p}_{\underline{r}} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \underline{r}}$
Energía total E	$\hat{E} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
Energía potencial V	$\hat{V} \equiv V(\underline{r})$

Tabla 2.1: Relación de los operadores cuánticos donde el símbolo $\hat{}$ sobre la variable dinámica denota que es un operador.

operador \hat{y} . La función de onda Ψ que satisface $\hat{y} \Psi = y \Psi$ se llama función propia.

Los valores propios son las únicas medidas que se pueden hacer sobre las variables dinámicas. Las funciones de onda describiendo partículas son, en general, representadas en forma de onda y de ahí su nombre. El significado físico de la función de onda Ψ , asumiendo que Ψ se aplica a un electrón, es que $\Psi \Psi^* d\underline{r}$ es interpretado como la probabilidad de que el electrón sea encontrado en el elemento de volumen $d\underline{r}$ en cualquier instante t .

Vamos a considerar que nuestro sistema es conservativo, con lo que la energía total del sistema no varía. Aplicamos a la ecuación de Schrödinger la separación de variables siguiente:

$$\Psi(\underline{r}, t) = \psi(\underline{r})\phi(t). \quad (2.3)$$

La solución a la ecuación de Schrödinger utilizando la relación (2.3) da

$$\Psi(\underline{r}, t) = A\psi(\underline{r}) \exp \{-iEt/\hbar\}, \quad (2.4)$$

donde A es una constante de integración. Es fácil ver que $\Psi \Psi^* = \psi \psi^*$, con lo que la densidad de probabilidad es independiente del tiempo. Estas funciones de ondas se les llama estacionarias, y los estados representados por estas funciones son llamados estados estacionarios.

Un ejemplo de solución a la ecuación de onda de Schrödinger es la de electrón libre, donde la energía potencial V es constante. Arbitrariamente se puede escoger $V = 0$. Ello nos da una solución en la que la densidad de probabilidad $\Psi \Psi^*$ es independiente de las variables espaciales y temporal, i.e., la probabilidad de encontrar un electrón es la misma en cualquier lugar y la función de onda no transmite conocimiento acerca de una localización precisa del electrón. Además se obtiene que la energía es

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.5)$$

2.1. Conceptos generales de la teoría semiclásica del movimiento electrónico

donde k es el número de onda del electrón [4].

2.1.1 Ecuación de Schrödinger en un potencial periódico y teoría de bandas

Una estructura cristalina está formada únicamente por una red más una base. La red representa un conjunto de puntos en el espacio con estructura periódica. La red típica de los semiconductores es la red de *Bravais* de tipo cúbica centrada en la cara (*fcc* en sus siglas en inglés) [3]. En cada punto de la red se encuentra un conjunto de átomos, la base, y se repite a lo largo de todo el cristal.

Todos los puntos de un sólido cristalino tridimensional se pueden expresar como una combinación lineal con coeficientes enteros de tres vectores fijos \underline{a}_i , $i = 1, 2, 3$, donde a estos vectores fijos se les llama *vectores primitivos de la red* y por simplicidad los denotaremos por \underline{a} . Una vez obtenido el cristal, al bloque de construcción más básico (volumen definido por los tres vectores primitivos) se le llama celda primitiva o celda unitaria.

Para comprender la propiedades de los electrones en una superred se estudiará a continuación sus propiedades en una estructura cristalina ideal perfectamente periódica en que se ignora cualquier tipo de colisión, i.e., no se tiene en cuenta los procesos de *scattering*. Una descripción del electrón en dicha red se realiza mediante la ecuación de Schrödinger con un potencial periódico V ,

$$\hat{H}\Psi(\underline{r}) = E\Psi(\underline{r}), \quad (2.6)$$

donde el operador hamiltoniano es $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\underline{r})$. Llamemos vector de red \underline{l} a dicho vector de traslación que es combinación lineal de los vectores primitivos de la red. El potencial V se repite periódicamente con la misma constante que la red, con lo que se cumple

$$V(\underline{r}) = V(\underline{r} + \underline{l}). \quad (2.7)$$

con

$$\underline{l} = n \underline{a} \quad (2.8)$$

y n entero. Debido a que la estructura cristalina es periódica, se puede esperar que la *conducta* del electrón sea igual en todas las celdas unitarias del cristal, i.e., que la densidad de probabilidad del electrón tenga la misma periodicidad:

$$\Psi(\underline{r})\Psi^*(\underline{r}) = \Psi(\underline{r} + \underline{l})\Psi^*(\underline{r} + \underline{l}). \quad (2.9)$$

Dicho comportamiento se demuestra a través del teorema de Bloch ¹ [3, 5] y con lo que las funciones propias Ψ correspondientes son productos de una onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ por unas funciones $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.10)$$

siendo \mathbf{k} el vector de onda del cristal y donde las funciones $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tienen la misma periodicidad que el potencial V ,

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{l}). \quad (2.11)$$

Partiendo de (2.10) y (2.11) se llega a que la función de onda del electrón satisface la propiedad

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

A la función de onda del electrón Ψ y a las funciones u también se les llama función de onda de Bloch y funciones de Bloch respectivamente. Las funciones de onda de Bloch son las soluciones de la ecuación de Schrödinger (2.6).

Por otra parte, una red asociada a la red física del cristal se llama red recíproca, que es la red en el espacio de vectores de onda \mathbf{k} . Si hacemos incidir una cierta radiación (como electrones) sobre un sólido se puede producir el fenómeno de la difracción. La condición de difracción para la radiación es que el vector de onda $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ sea precisamente un vector de la red recíproca, donde \mathbf{k} es el vector de onda incidente y \mathbf{k}' el de la difractada. El equivalente a los vectores primitivos del sólido cristalino son los vectores primitivos de la red recíproca que por simplicidad lo denotaremos por \mathbf{b} y que cumplen

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{a} = 2\pi \quad (2.13)$$

y donde el vector de onda del cristal \mathbf{k} se expresa como

$$\mathbf{k} = p \mathbf{b} \quad (2.14)$$

con p entero. El equivalente de la celda primitiva en la red recíproca se le llama primera zona de Brillouin. Un estudio detallado sobre la red recíproca aparece en el capítulo 2 de [6].

Mediante el modelo de Kronig-Penney se halla la solución de la ecuación de Schrödinger (2.6) para un potencial periódico V unidimensional [3] (ver figura 2.1) del tipo

¹el cual establece que el espectro del Hamiltoniano es continuo, con bandas de energía que son funciones periódicas del vector de onda con la periodicidad de la red recíproca y separadas entre ellas por gaps

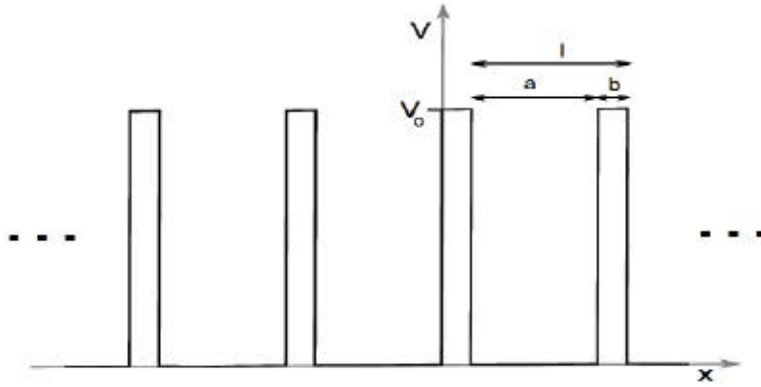


Figura 2.1: Esquema de un potencial periódico.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < x - nl \leq a \\ V_0 & \text{si } a < x - nl \leq b, \end{cases} \quad \text{para } n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.15)$$

y se llega a la siguiente relación entre el período del potencial l , la energía E y el número de onda del electrón k ,

$$\cos(kl) = f(E), \quad (2.16)$$

donde

$$f(E) = \cosh(k_2 b) \cos(k_1 a) - \frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1 k_2} \sinh(k_2 b) \sin(k_1 a) \quad (2.17)$$

y

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (2.18)$$

En la figura 2.2 (a) se representa un esquema de la relación (2.16). El valor l tiene dimensiones espaciales, por lo que $l \in \mathbb{R}^+$ y no existe solución para los valores de kl para los cuales $|f(E)| > 1$ (zona punteada en la figura 2.2 (a)). A los valores de energía E para los que no hay solución los llamaremos bandas de energía prohibida o *gaps* de energía. Las ecuaciones (2.17) y (2.18) dan las bandas de energía permitidas $E_n(k)$, $n = 1, 2, \dots$, como funciones del vector de onda k . Una manera muy común de representar las bandas de energía y los *gaps* a partir del esquema de la figura 2.2 (a) es disponer en el eje de ordenadas los valores de E y en el de abscisas los valores de k . Al esquema resultante se le llama *diagrama de bandas* o *diagrama $E - k$* (ver figura 2.2 (b)). En él se representa los niveles de energía permitidos para los

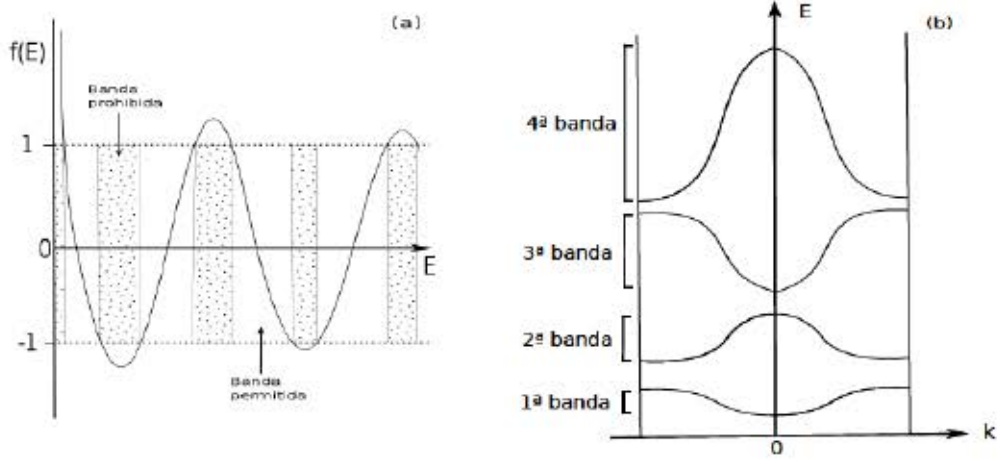


Figura 2.2: (a) Representación de la gráfica $f(E)$. (b) Esquema del diagrama de bandas.

electrones y los *gaps* verticalmente en la primera zona de Brillouin, donde a continuación se muestra que cualquier vector de onda \underline{k} puede ser descrito sin salir de la primera zona de Brillouin.

Sea \underline{k} un vector de onda que esté fuera de la primera zona de Brillouin. Entonces existirá un par de vectores \underline{k}' y \underline{k}'' , el primero dentro de la primera zona de Brillouin y el segundo $\underline{k}'' = q\underline{b}$, con q entero. Sea la función de onda de Bloch

$$\Psi_{\underline{k}}(\underline{r} + \underline{l}) = u_{\underline{k}}(\underline{r}) e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}. \quad (2.19)$$

Partiendo de (2.12) entonces

$$\Psi_{\underline{k}}(\underline{r} + \underline{l}) = e^{i\underline{k} \cdot \underline{l}} \Psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = e^{i(\underline{k}' + \underline{k}'') \cdot \underline{l}} \Psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}' \cdot \underline{l}} e^{i2pq\pi} \Psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}' \cdot \underline{l}} \Psi_{\underline{k}}(\underline{r}),$$

donde se ha utilizado de antes que $\underline{l} = p\underline{a}$, $\underline{b} \cdot \underline{a} = 2\pi$ y que $\underline{k}'' = q\underline{b}$.

Teniendo en cuenta (2.16), otra importante característica del diagrama $(E - k)$ es que las relaciones de dispersión $E_n(k)$ son funciones periódicas de k con periodo $2\pi/l$, con lo que los valores de E serán simétricos respecto de $k = 0$.

En el siguiente apartado relacionaremos todo lo dicho hasta ahora con el dispositivo físico estudiado en esta tesis. Dicha superred estará compuesta de capas de distintos semiconductores dispuestos de manera periódica que tendrán asociadas bandas de energía tridimensionales. En general las bandas unidimensionales directamente asociadas con el eje de crecimiento de una superred son mucho más pequeñas que las otras, por lo que se las llama *minibandas* con sus correspondientes *minigaps*. Por lo tanto si consideramos

el problema en tres dimensiones, resulta que el electrón estará confinado en la dirección de crecimiento del potencial V , y en las otras dos direcciones se comportará como una partícula libre.

Para bandas de energía estrechas y amplios *gaps* (llamado *límite tight-binding*) podemos aproximar la relación de dispersión de una banda de índice n [3] por

$$E_n(\underline{k}) = E_n^c + (-1)^n \frac{\Delta_n}{2} \cos(kl) + \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + k_z^2), \quad (2.20)$$

donde E_n^c denota el centro de las bandas de energía y k es la componente del vector de onda en la dirección del eje x del crecimiento del potencial donde kl varía en $-\pi$ y π mientras que k_y, k_z son números reales.

2.2 El dispositivo físico

A grandes rasgos, una superred es un cristal artificial, delimitado en los extremos por contactos, que tiene una estructura periódica de capas nanométricas de distintos materiales semiconductores que se van repitiendo, lo cual configura un potencial periódico V para la conducción de electrones. Como las energías de las bandas de conducción y de valencia así como el *gap* entre ellas son diferentes para los distintos materiales, las bandas de la red son una sucesión periódica de pozos y barreras. Un electrón que se mueva en la dirección de crecimiento de la superred (eje x en la figura 2.5) se encontrará con un potencial periódico formado por una sucesión de pozos y barreras. Según la anchura de estas barreras las superredes se pueden clasificar en débilmente o fuertemente acopladas. El dispositivo estudiado en esta tesis tendrá las barreras lo suficientemente pequeñas para considerarse una superred fuertemente acoplada, donde la longitud de onda del electrón es mayor que el período de la SL [7]. Para este tipo de superredes, la dinámica electrónica a nivel mesoscópico consiste en un dipolo de carga que se mueve con el flujo de electrones a través de la muestra, parecido al efecto Gunn en semiconductores de tipo *bulk* [8]. Bajo un cierto rango de valores del voltaje aplicado, este movimiento electrónico puede resultar periódico dando lugar a oscilaciones auto-sostenidas de la corriente. De manera macroscópica, esto se traduce en un flujo de electrones que al pasar por una sección transversal del dispositivo definen una corriente que depende entre otras variables de la velocidad y del perfil del dipolo de la densidad electrónica.

A continuación vamos a describir paso a paso la superred estudiada en esta tesis. En el dispositivo se encuentran de manera alternada una capa de material semiconductor AlAs de 1nm de espesor con otra de GaAs de

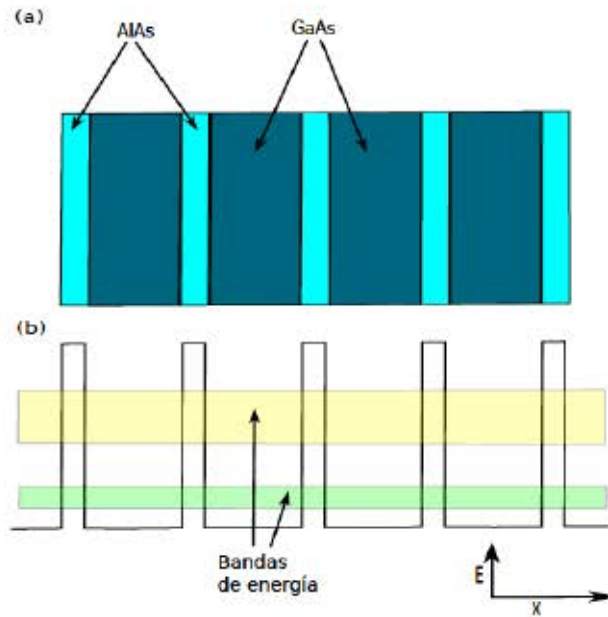


Figura 2.3: (a) Esquema de la disposición de las distintas capas de material semiconductor y (b) representación de la energía potencial asociada con las dos primeras minibandas de energía.

7nm, y así sucesivamente hasta obtener 14 periodos. Cada capa de AlAs crea una barrera de potencial al movimiento del electrón donde a la zona entre las barreras la llamaremos pozo cuántico, que corresponde al GaAs (ver figura 2.3 (a) y (b)). Esta disposición periódica de las barreras ensanchan los niveles energéticos disponibles para la distribución de los electrones en bandas de un determinado ancho. Una particularidad del dispositivo es que se introduce una capa de 0.3nm de InAs (i.e., un ancho de $0.8 ML^2$) en el centro de cada pozo cuántico del GaAs. Esto último produce una muesca en la energía potencial del electrón (ver figura 2.4) que tiene dos efectos principalmente. Uno es que *baja* la primera minibanda, sin apenas modificar la segunda, facilitando la inyección de electrones sobre dicha minibanda desde el contacto inyector. La otra es que aumenta por lo tanto el *minigap* entre la primera minibanda y la segunda (ver figura 2.4) [9]. Este segundo efecto es fundamental para que la descripción semiclásica por transporte de minibanda sea apropiada, ya que debido al aumento del *minigap* entre la primera y la segunda minibanda la dinámica electrónica está confinada a la minibanda más baja. Por lo tanto, a la heteroestructura descrita en esta sección la llamaremos superred GaAs/AlAs/InAs [11]. Además, las sucesivas capas de

²monocapa

AlAs y de GaAs (junto con la introducción en estas últimas de la monocapa de InAs) están depositadas sobre un sustrato de GaAs altamente dopado.

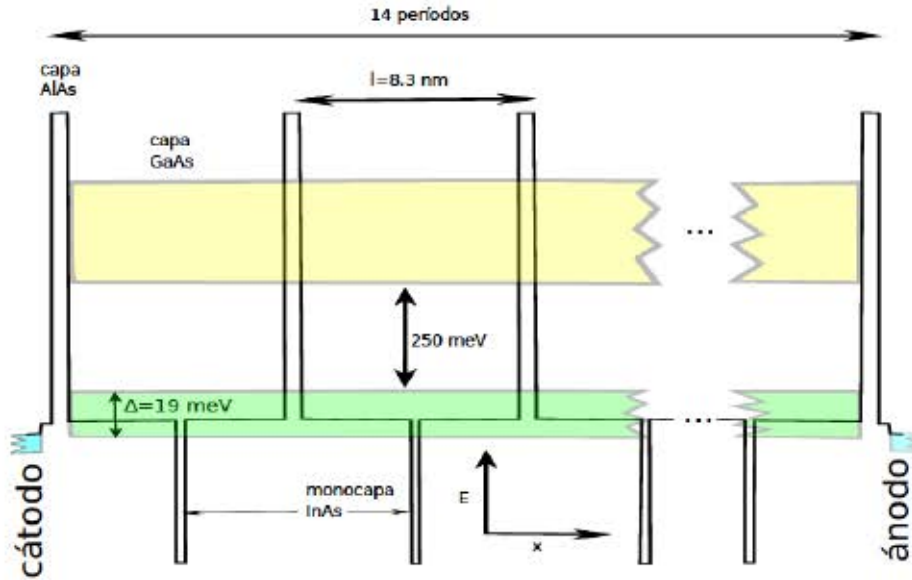


Figura 2.4: Variación de la energía potencial de la SL. El efecto de introducir una capa de InAs en el centro de cada pozo produce un ensanchamiento del *minigap* entre las dos primeras minibandas de energía. Los electrones son inyectados por el cátodo a la menor minibanda (en verde).

Las dimensiones del dispositivo son: en el eje de crecimiento de la SL, 14 períodos de $l = 8.3$ nm cada uno con pozos de ancho $w = 3.5$ nm (GaAs) + 0.3 nm (InAs) + 3.5 nm (GaAs) = 7.3 nm, con barreras de $b = 1$ nm (AlAs) además de los contactos, mientras que en las otras dos direcciones las dimensiones totales serán de $20\mu\text{m}$ (ver figura 2.5).

Por último, al dispositivo se le aplica un campo magnético \underline{B} de intensidad B con un ángulo θ entre el eje de crecimiento de los pozos y el eje z , tal como muestra la figura 2.5. La temperatura de la superred es de $T = 4.2\text{K}$.

2.3 Transporte por minibanda

En esta sección y mediante la teoría de transporte por minibanda introducimos fuerzas adicionales debidas a un campo eléctrico y a un campo magnético. Se calcula el comportamiento tanto de la posición como del vector de onda del electrón dependiente del tiempo. Por contrapartida este modelo

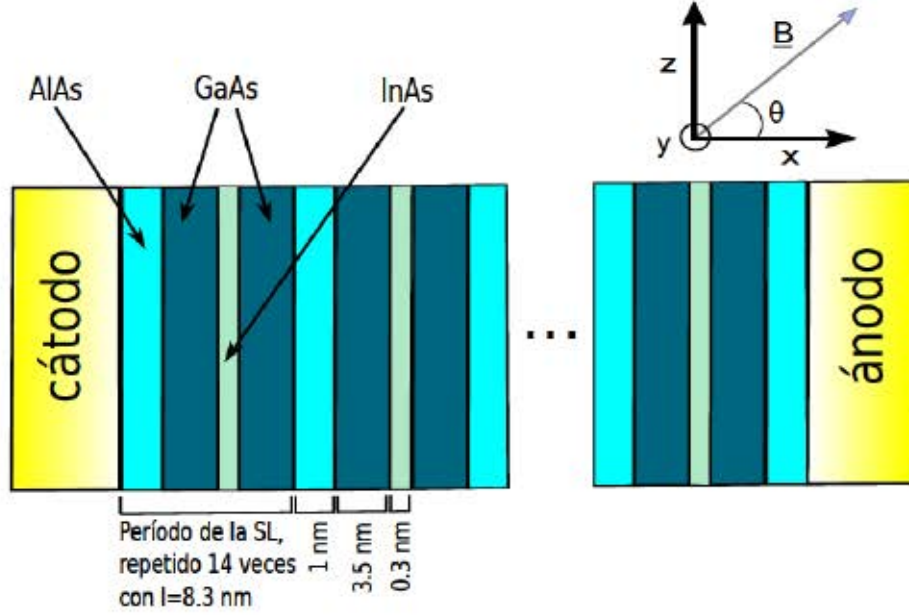


Figura 2.5: Esquema de la superred, donde se alternan capas en su período base de la siguiente manera: dos capas de 3.5 nm de GaAs (color verde), una capa de 0.3 nm de InAs (color azul claro) y una última capa-barrera de 1 nm de AlAs (color azul). El campo magnético forma un ángulo θ con el eje x .

todavía no añade el efecto de las colisiones o *scattering*, lo cual se introducirá más tarde.

De los estados de Bloch (2.20) para la aproximación en el *límite tight-binding* obtenemos para $n = 1$ la relación de dispersión para la primera minibanda [3],

$$E(\underline{k}) = \frac{\Delta}{2}(1 - \cos kl) + \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + k_z^2), \quad (2.21)$$

donde por claridad $\Delta_1 = \Delta$. Para describir el transporte de electrones dentro de la primera minibanda de energía utilizamos la velocidad de grupo semiclásica del paquete de ondas siguiente:

$$\dot{\underline{r}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\underline{k})}{\partial \underline{k}}. \quad (2.22)$$

Esta relación para la velocidad es válida solo cuando los campos externos, campo eléctrico y campo magnético, son constantes en cada punto del paquete de ondas.

De aplicar (2.22) a (2.21) obtenemos

$$\dot{x} = \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin kl, \quad (2.23)$$

$$\dot{y} = \frac{\hbar}{m} k_y, \quad (2.24)$$

$$\dot{z} = \frac{\hbar}{m} k_z. \quad (2.25)$$

Si utilizamos que $-e$ es la carga del electrón y que $\underline{F} = \nabla W$ es menos el campo eléctrico, entonces la fuerza de Lorentz está dada por f_L ,

$$f_L = -e(-\underline{F} + \underline{v} \times \underline{B}), \quad (2.26)$$

de donde obtendremos las ecuaciones semiclásicas de movimiento del electrón. De (2.26) obtenemos

$$\hbar \dot{k} = eF - \frac{e\hbar k_y}{m} B \sin \theta, \quad (2.27)$$

$$\hbar \dot{k}_y = -\left(\frac{\hbar k_z}{m} \cos \theta - \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin kl \sin \theta\right) eB + eF_y, \quad (2.28)$$

$$\hbar \dot{k}_z = eF_z + \frac{eB}{m} \hbar k_y \cos \theta, \quad (2.29)$$

donde se ha utilizado que

$$\begin{aligned} \underline{v} \times \underline{B} &= \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ v(k) & v_y & v_z \\ B \cos \theta & 0 & B \sin \theta \end{vmatrix} = \hat{x}(v_y B \sin \theta) \\ &+ \hat{y}(v_z B \cos \theta - v(k) B \sin \theta) - \hat{z}(v_y B \cos \theta). \end{aligned}$$

Podemos expresar la variación de la componente y del vector de onda del cristal a partir de la velocidad en x y z de la siguiente manera:

$$\hbar \dot{k}_y = eF_y + (\dot{x} \sin \theta - \dot{z} \cos \theta) eB,$$

con lo que integrando respecto del tiempo obtenemos

$$\hbar k_y - eB(x \sin \theta - z \cos \theta) = e \int F_y dt.$$

Si asumimos que W es independiente de y , entonces

$$k_y = \frac{eB}{\hbar} (x \sin \theta - z \cos \theta), \quad (2.30)$$

más una constante que descartamos. Mediante la relación 2.30 se obtiene el sistema reducido

$$\dot{x} = \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin kl, \quad (2.31)$$

$$\dot{z} = \frac{\hbar}{m} k_z, \quad (2.32)$$

$$\hbar \dot{k} = eF - \frac{eB}{m} \hbar k_y \sin \theta, \quad (2.33)$$

$$\hbar \dot{k}_z = eF_z + \frac{eB}{m} \hbar k_y \cos \theta. \quad (2.34)$$

2.3.1 Oscilaciones de Bloch y oscilaciones ciclotrónicas

Sea el caso en que el campo magnético es paralelo al eje de crecimiento de los pozos, i.e., $\theta = 0^\circ$ en las ecuaciones anteriores (2.31)-(2.34). Tomando el campo eléctrico constante, resolviendo la ecuación diferencial (2.33), tomando por simplicidad la constante aditiva de integración nula y sustituyendo en (2.31) hallamos que la componente x del movimiento del electrón depende de la frecuencia eFl/\hbar :

$$\dot{x} = \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin \left(\frac{eFl}{\hbar} t \right). \quad (2.35)$$

Este resultado es similar para sistemas unidimensionales donde no hay influencia de un campo magnético. A la variable \dot{x} la llamaremos componente x de la velocidad de grupo v_g . La frecuencia $\omega_B = \frac{eFl}{\hbar}$ que presenta dicha componente de la velocidad de grupo se llama frecuencia del oscilador de Bloch [12, 13, 14]. Por lo tanto, estas oscilaciones con frecuencia ω_B aparecen en el movimiento electrónico cuando no se consideran procesos de colisiones en los electrones (y la velocidad de grupo v_g no los contempla) y el campo eléctrico es constante. Sin campos magnéticos de por medio, estas oscilaciones fueron predichas por Zener en 1934 [15] y no fueron encontradas hasta 1992 en experimentos de superredes no dopadas [16], donde el periodo l de las muestras debía de ser mucho menor que cualquier proceso de colisión de los electrones.

Por otra parte, y continuando con el caso $\theta = 0^\circ$, de aplicar el operador diferencial $\frac{d}{dt}$ en la EDO (2.34) y considerar (2.30) obtenemos que $\ddot{k}_z + \omega_c^2 k_z = 0$, cuya solución es el oscilador armónico simple de frecuencia $\omega_c = \frac{eB}{m} \cos \theta = \frac{eB}{m}$. A la frecuencia ω_c que depende del ángulo θ y de la intensidad magnética B se la llama frecuencia ciclotrónica. Se sigue que la

componente z de la órbita del electrón, solución de la ecuación (2.32), solo depende de dicha frecuencia ω_c . En conclusión, para valores $\theta = 0^\circ$, en el movimiento electrónico semiclásico la frecuencia de Bloch está desacoplada de la frecuencia ciclotrónica.

Para entender el efecto que produce el campo magnético con un ángulo $0 < \theta < \pi/2$ sobre la dinámica electrónica volvemos al conjunto de ecuaciones diferenciales (2.31)-(2.34) del movimiento del electrón para campos constantes y sin presencia de colisiones. Aplicamos el operador $\frac{d}{dt}$ sobre (2.34), sustituimos en la ecuación diferencial resultante la relación de k_y (6.6) y luego las ecuaciones (2.31) y (2.32), obteniendo

$$\ddot{k}_z + \omega_c^2 k_z = \frac{e^2 B^2 \Delta l}{4m\hbar^2} \sin 2\theta \sin kl.$$

Si integramos sobre la variable temporal las ecuaciones diferenciales (2.31) y (2.33) obtenemos la relación

$$k = \frac{eF}{\hbar} t - \left(k_z - k_{z_0} - \frac{eF_z}{\hbar} t \right) \tan \theta + k_0,$$

donde k_0 y k_{z_0} son las constantes de integración. Sustituyendo esta última ecuación en la EDO de segundo orden para k_z se obtiene la ecuación diferencial para el oscilador armónico forzado:

$$\ddot{k}_z + \omega_c^2 k_z = \frac{e^2 B^2 \Delta l}{4m\hbar^2} \sin 2\theta \sin \left\{ \left(\omega_B + \frac{eF_z l}{\hbar} \tan \theta \right) t - l(k_z - k_{z_0}) \tan \theta + lk_0 \right\}. \quad (2.36)$$

La órbita del electrón se modificará debido al acoplamiento en la anterior ecuación, entre la frecuencia ciclotrónica ω_c y la frecuencia de Bloch ω_B y en concreto de la frecuencia natural ω_c y la frecuencia *conductora* $\omega_B + \frac{eF_z l}{\hbar} \tan \theta$ del oscilador.

Capítulo 3

Estudios previos sobre la superred GaAs/AlAs/InAs

Hay una gran diversidad de trabajos publicados en revistas y libros sobre el dispositivo estudiado en esta tesis, en donde se han realizado estudios experimentales y/o teóricos de la muestra. A continuación se presenta un resumen de los trabajos relacionados con la nanoestructura y ordenados cronológicamente, con una breve descripción de cada uno. En las siguientes secciones se describirán en más profundidad. Los parámetros del dispositivo descrito en el capítulo anterior están tomados de estos trabajos. Además, el presente capítulo da la motivación para el desarrollo de un nuevo modelo que complementa los estudios ya realizados sobre el transporte electrónico en superredes bajo la acción de un campo magnético.

En el artículo realizado en el año 2001 por Fromhold et al. [17], se investiga a nivel teórico una muestra GaAs/(Al_{0.3}-Ga_{0.7})As (sin la monocapa de InAs) de solo tres pozos. En él se propone un oscilador armónico forzado para describir el movimiento clásico electrónico bajo la influencia del campo magnético. Finalmente se calcula una velocidad *drift* v_d , que es la velocidad electrónica que considera las colisiones de los electrones, usando el modelo de Esaki-Tsu [18]. Cuando se cumple una determinada condición de resonancia en el oscilador armónico, las trayectorias de los electrones trazan patrones intrincados de redes estocásticas en el espacio fásico. Esto hará que las órbitas de los electrones resulten parcialmente no acotadas y justifique incrementos en la corriente. Toda esta argumentación servirá de base para el modelaje teórico en los siguientes artículos.

En el estudio de [19], Patané et al. (2002) investigan en una superred GaAs/AlAs cómo afecta en las bandas de energía la introducción de una monocapa de InAs. Tal como se indicó en la sección (2.2), los efectos princi-

pales de la inclusión de este material es que se reduce la energía de la primera minibanda facilitando la inyección de electrones desde el cátodo y aumenta el *minigap* entre la primera y la segunda minibandas.

En el artículo publicado en *Nature* [20], Fromhold et al. (2004) vuelven a realizar los mismos estudios realizados en [17] pero esta vez sobre el mismo dispositivo que se estudia en la presente tesis. Además, se muestran datos experimentales relativos a intensidades magnéticas de $B = 11T$.

En el trabajo de Fowler et al. [21] del año 2006 se muestra una dependencia entre los tiempos de *scattering* y las intensidades del campo magnético B . A mayor intensidad magnética los tiempos entre colisiones inelásticas aumentan. Este dato se tendrá en cuenta para encontrar oscilaciones autosostenidas de la corriente en las simulaciones realizadas en esta tesis.

En [22] de Patanè et al. (2006) se hace una revisión de los trabajos previos [17], [20] y [21].

En la tesis doctoral de Hardwick (2007) [23] se describe el modelo que aparece en [20] basado en la teoría semiclásica del movimiento electrónico y en el modelo de Esaki-Tsu para calcular distintos perfiles del par velocidad *drift* y campo eléctrico $v_d F$. Debido al acoplamiento entre las oscilaciones de Bloch, ω_B , y las ciclotrónicas, ω_c , dichos perfiles presentan máximos relativos adicionales solo a partir de intensidades magnéticas de $B = 8T$.

En el trabajo de Fowler et al (2007) [10] se muestran datos experimentales relativos a la curva $I(V)$ con intensidades magnéticas de hasta 47T para ángulos θ de 0° y 30° . Se pone de manifiesto que la característica corriente-voltaje $I(V)$ tiene una dependencia clara en la intensidad B y en el ángulo θ .

En Greenaway et al. (2009) [11] se extiende el modelo teórico estudiado en los trabajos anteriores para calcular oscilaciones autosostenidas la corriente. Estas soluciones estacionarias y periódicas son obtenidas a partir de ondas viajeras de densidades electrónicas calculadas mediante una ecuación de transporte de carga unidimensional. En particular, se concluye que los diferentes máximos relativos adicionales que aparecen en los perfiles del par $v_d F$ inducen múltiples dominios de carga propagándose a través de la muestra que *refuerzan* las oscilaciones de la corriente.

En Sel'skii et al. (2011) [24] se calcula el efecto de la temperatura en la velocidad *drift* para $B = 15T$ y $\theta = 40^\circ$ siguiendo el modelo propuesto por Fromhold et al. en 2001 [17]. Se concluye, entre varios resultados, que para $T < 50K$ los cambios en la temperatura no tienen un efecto significativo en el transporte electrónico. Cabe recordar que la temperatura considerada para la superred GaAs/AlAs/InAs estudiada en esta tesis es de $T = 4.2K$.

En el capítulo 5 de [9] se revisa la teoría que sustenta el cálculo de los

perfiles v_d-F .

En el trabajo de Balanov et al. (2012) [25] se investiga el efecto del incremento de la temperatura (hasta temperatura ambiente) sobre el dispositivo mediante un modelo similar a [11] incluyendo un término difusivo en la ecuación de transporte. Se concluye en el trabajo que a mayor temperatura las oscilaciones de la corriente de la superred disminuyen tanto en amplitud como en frecuencia.

Alexeeva et al. en 2012 [26] analizan una muestra de quince pozos cuánticos siendo los demás parámetros del dispositivo iguales al del dispositivo estudiado en esta memoria. Se obtienen datos experimentales a temperaturas de $T = 4.2\text{K}$ con $B = 7\text{T}$ y también a $T = 293\text{K}$ pero sin presencia de campo magnético. Se comparan resultados usando el modelo teórico descrito en [11].

En el capítulo 5 de [27], Greenaway et al. (2012) detallan el modelo teórico utilizado en [11].

En [28] Sel'skii et al. (2015) hacen un estudio teórico de la SL a $B = 15\text{T}$ utilizando el mismo modelo que en [11] pero a temperatura $T = 200\text{K}$. Además, se construye un retrato fásico a partir del método propuesto por Takens [29], donde se pinta la corriente $I(t)$ vs $I(t - t^*)$ en el que t^* es un tiempo de demora igual a un cuarto de periodo dentro de un régimen de oscilaciones de la corriente estacionario.

3.1 Estudios experimentales

Pasamos a describir con un poco más de detalle los trabajos anteriores en los que se describen experimentos realizados con la SL descrita en la sección (2.2). Se recogen los detalles macroscópicos experimentales del transporte electrónico, que son la dependencia de las curvas $I(V)$ del campo magnético aplicado. A menos que se diga lo contrario, todos los experimentos se realizan a una temperatura $T = 4.2\text{K}$.

La superred es creada usando la técnica de crecimiento epitaxial por haces moleculares [30](MBE en sus siglas en inglés), donde los haces inciden sobre un sustrato de GaAs en el que se hace crecer las capas sucesivas de material semiconductor.

En el artículo de *Nature* [20] se muestran distintos perfiles de la curva $I(V)$ donde se fija la intensidad magnética $B = 11\text{T}$ y se varía el ángulo θ del campo magnético \underline{B} relativo al eje de crecimiento de la superred para valores $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$. La curva experimental correspondiente a $\theta = 0^\circ$ muestra un comportamiento óhmico de la corriente I hasta un voltaje aproximadamente

de $V \approx 200\text{mV}$, y a partir de ese valor se mantiene a un valor constante de $I \approx 11\text{mA}$. Pero para las curvas $I(V)$ correspondientes a los valores de $10^\circ \leq \theta \leq 55^\circ$ se observa en todas ellas una región donde hay un aumento de la corriente a partir de $V \approx 250\text{mV}$. Estos incrementos se justifican en el artículo mediante cálculos donde la entrada en resonancia de las oscilaciones de Bloch y las oscilaciones ciclotrónicas generan *extensiones* en las trayectorias semiclásicas del electrón.

En el trabajo de Fowler et al. [10] se experimenta con distintas intensidades magnéticas, de hasta 47T, para ángulos θ de 0° y 30° . Las mediciones de la corriente-voltaje $I(V)$ se toman al máximo del pulso del campo magnético dentro de un milisegundo, en el que la intensidad de dicho campo se mantuvo constante dentro del $\pm 1\%$. Las mediciones muestran que la característica corriente-voltaje, curvas $I(V)$ en la figura 3 de [10], tiene una dependencia clara en la intensidad B y del ángulo θ . De manera resumida, se puede decir que fijando el ángulo $\theta = 0^\circ$, una mayor intensidad B del campo magnético produce una supresión de la corriente I en el dispositivo: a intensidad magnética nula, el máximo local observable de la corriente es de aproximadamente 17mA justo en la zona donde acaba la región óhmica de $I(V)$ y comienza la zona de conductancia diferencial negativa, mientras que este máximo local decrece hasta llegar aproximadamente a los 2.5mA para $B = 47\text{T}$. Por otra parte, si se fija el ángulo θ a 30° el comportamiento óhmico es similar que en el caso $\theta = 0^\circ$, pero a medida que van aumentando los voltajes y por lo tanto los campos eléctricos la corriente experimenta un fuerte crecimiento.

En el artículo de Alexeeva et al [26] se construye una superred de las mismas características excepto en que se añade un período más, con un total de quince pozos. Además de obtener datos a distintas temperaturas, se consigue medir las frecuencias y las amplitudes de las oscilaciones de la corriente en la SL mediante un analizador de espectro *Anritsu* (MS2667C) para $T = 4.2\text{K}$ y $B = 7\text{T}$. En particular se alcanzan amplitudes máximas de las oscilaciones de la corriente de 0.6mA cuando $60^\circ \leq \theta \leq 75^\circ$ y se registran frecuencias de aproximadamente 0.8GHz (ver figura 3 de [26]).

3.2 Estudios teóricos

En los sucesivos apartados se desarrollan los conceptos teóricos que aparecen en los distintos artículos. Tales conceptos engloban la deducción de la ecuación del oscilador armónico forzado a partir de las ecuaciones semiclásicas del movimiento del electrón suponiendo un campo eléctrico unidimensional. La solución numérica de la ecuación del oscilador servirá para calcular una

velocidad drift $v_d(F)$ para los electrones, usando una generalización de la formulación del modelo unidimensional de Esaki-Tsu. Dicha velocidad incluirá los efectos de *scattering*. Fijando un ángulo θ y una intensidad magnética B , la velocidad *drift* v_d servirá para construir los perfiles teóricos v_d-F . Finalmente, el modelo se complementa con el cálculo de dominios viajeros de carga que generan oscilaciones autosostenidas de la corriente.

3.2.1 Modelo semiclásico

Siguiendo el mismo procedimiento que en la sección 2.3 para la dinámica del transporte por minibanda, pero considerando un campo eléctrico con únicamente la componente x no nula, se llega al sistema de ecuaciones semiclásico [9]

$$\dot{x} = \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin kl, \quad (3.1)$$

$$\dot{z} = \frac{\hbar}{m} k_z, \quad (3.2)$$

$$\hbar \dot{k} = eF - \frac{eB}{m} \hbar k_y \sin \theta, \quad (3.3)$$

$$\hbar \dot{k}_z = \frac{eB}{m} \hbar k_y \cos \theta, \quad (3.4)$$

$$\hbar \dot{k}_y = eB (\dot{x} \sin \theta - \dot{z} \cos \theta), \quad (3.5)$$

que es similar al sistema (2.31)-(2.34), salvo por las componentes F_y , F_z del campo eléctrico que son nulas. Aplicando el operador $\frac{d}{dt}$ a (3.4), sustituyendo en la ecuación diferencial resultante la relación de \dot{k}_y (3.5) y luego las ecuaciones (3.1) y (3.2), se obtiene

$$\ddot{k}_z + \omega_c^2 k_z = \frac{e^2 B^2 \Delta l}{4m\hbar^2} \sin 2\theta \sin kl,$$

donde $\omega_c = \frac{eB}{m} \cos \theta$ es la frecuencia ciclotrónica. Si integramos sobre la variable temporal la ecuación diferencial (3.3) utilizando (3.4) obtenemos la relación

$$k = \frac{eF}{\hbar} t - (k_z - k_{z_0}) \tan \theta + k_0,$$

donde k_0 y k_{z_0} son las constantes de integración. Sustituyendo esta última ecuación en la EDO de segundo orden para k_z se obtiene la ecuación diferen-

cial para el oscilador armónico forzado,

$$\ddot{k}_z + \omega_c^2 k_z = \frac{e^2 B^2 \Delta l}{4m\hbar^2} \sin 2\theta \sin \{\omega_B t - l(k_z - k_{z_0}) \tan \theta + lk_0\}, \quad (3.6)$$

donde $\omega_B = \frac{eFl}{\hbar}$ es la frecuencia de Bloch. Por lo tanto, resolviendo la ecuación diferencial anterior se hallan todas las variables del sistema semi-clásico. En concreto, resolviendo la ecuación del oscilador armónico forzado se halla la velocidad en la dirección x del electrón \dot{x} . A partir de ahora a esta velocidad (que no tiene en cuenta el *scattering*) la llamaremos velocidad de grupo unidimensional $v_x = \dot{x}$: partiendo de unas condiciones iniciales, fijando los parámetros intensidad y ángulo del campo magnético (B y θ respectivamente) y suponiendo que se conoce el campo eléctrico F , podremos calcular, una vez resuelta la EDO (3.6), la velocidad v_x que dependerá de los parámetros y variable anteriores, i.e., $v_x = v_x(F, B, \theta)$.

3.2.2 Scattering y cálculo de la velocidad *drift*

En este apartado se explica el procedimiento (tomado de [23]) de cómo se añade a la velocidad de grupo v_x los procesos de *scattering* o colisiones de los electrones, generalizando la formulación unidimensional de Esaki-Tsu [18].

Consideremos un tiempo medio de colisión τ . Llamaremos a la velocidad que tiene en cuenta τ velocidad drift v_d . Sea $N(t)$ el número de electrones que permanecen sin colisionar a tiempo t , con $N(0) = N_0$. Sea dt un intervalo de tiempo infinitesimal y sea dt/τ la probabilidad de que una colisión ocurra en el intervalo dt . Entonces $N(t)dt/\tau$ será el número de electrones que han colisionado dentro del intervalo dt . Consecuentemente el número de electrones que permanecen sin colisionar en el tiempo $t + dt$ será $N(t + dt) = N(t) - N(t)dt/\tau$. La tasa de cambio del número de electrones sin colisionar es:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{N(t + dt) - N(t)}{dt} = -\frac{N(t)}{\tau}. \quad (3.7)$$

Del problema de valor inicial

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{N(t)}{\tau}, \quad N(0) = N_0, \quad (3.8)$$

se obtiene que $N(t) = N_0 e^{-t/\tau}$. La probabilidad de que un electrón en el intervalo dt colisione se puede ver como el número de electrones que han colisionado dentro de dicho intervalo dividido por el número inicial de electrones

sin colisionar N_0 . Multiplicando dicha probabilidad por la velocidad v_x del sistema semiclásico e integrando sobre todo el dominio temporal se obtiene la velocidad *drift*

$$v_d = \int_0^\infty v_x(t) \frac{1}{\tau} \frac{N(t)}{N_0} dt = \int_0^\infty v_x(t) \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} dt. \quad (3.9)$$

La expresión y el valor numérico que se utiliza para τ es [11, 20, 23, 27]

$$\tau = \tau_i \sqrt{\frac{\tau_e}{\tau_i + \tau_e}} = 250 \text{ fs} \quad (3.10)$$

, donde τ_i representa el tiempo de colisión inelástico debido, por ejemplo, a fonones (vibraciones de la red causados por la temperatura T de la superred y al ancho Δ de la primera minibanda) y τ_e representa el tiempo de colisión elástico debido a las imperfecciones en la construcción de la superred. Estos valores están fijados a $\tau_i = 2.1\text{ps}$ y $\tau_e = 29\text{fs}$ en los trabajos [11, 20, 23, 27] para intensidades del campo magnético $11\text{T} \leq B \leq 15\text{T}$. Para otras tasas de *scattering* y otras intensidades magnéticas se puede tomar como referencia [21]. Por último, la velocidad drift se corrige multiplicándola por un factor $\delta = \tau/\tau_i$ [23, 27], con lo que

$$v_d = \frac{1}{\tau_i} \int_0^\infty dt v_x(t) e^{-t/\tau}. \quad (3.11)$$

Para la velocidad drift unidimensional resultante se han asumido las suposiciones de que después de cada colisión el momento del electrón es cero, el campo eléctrico F es únicamente no nulo en la dirección de crecimiento de los pozos cuánticos (debido a que el modelo de Esaki-Tsu es unidimensional), la intensidad del campo eléctrico se considera constante para la determinación de la característica $v_d - F$ (siguiente apartado 3.2.2.1), se descarta la expansión térmica de la distribución inicial del momento electrónico a temperaturas finitas, el tiempo de scattering, la intensidad del campo magnético, la temperatura y el potencial químico son constantes y los electrones no saltan entre bandas de energía [23, 31]. En el siguiente capítulo se detallará un modelo en el que sí se considerará una velocidad *drift* bidimensional y además tendrá en cuenta herramientas más contundentes para describir los mecanismos de *scattering*.

3.2.2.1 Característica Campo - Velocidad

El punto clave de la mayoría de los trabajos citados en este capítulo se debe al par velocidad drift - campo eléctrico ($v_d - F$). La curva $v_d - F$ se

obtiene a partir de considerar el campo eléctrico constante. La velocidad drift (3.11) se calcula como en la sección anterior, por lo que se deberá hallar la velocidad semiclásica o de grupo v_x resolviendo la ecuación diferencial de segundo orden del oscilador armónico forzado (3.6). Una técnica habitual consiste en tomar un promedio de más de 2500 condiciones iniciales, p_{x0} , q_{y0} y p_{z0} , determinadas por la condición [20, 23, 27]

$$E_{max} = E(p_x) + \frac{q_{y0}^2 + p_{z0}^2}{2m}, \quad (3.12)$$

donde E_{max} es la energía del electrón a partir de su temperatura efectiva T_{ef} . En [27] se considera $E_{max} \approx 10$ meV. Esta energía consiste en la temperatura de la superred, $T = 4.2\text{K}$, con lo que $k_B T \approx 0.4$ meV y de un calentamiento debido al voltaje que se toma como energía cinética del campo eléctrico de aproximadamente $\Delta/2$. La velocidad drift v_d , considerando las condiciones iniciales anteriores, queda

$$v_d = \frac{1}{\tau_i} \frac{1}{I} \sum_{i=0}^I \int_0^\infty dt v_{x,i}(t) e^{-t/\tau}. \quad (3.13)$$

El índice i del sumatorio representa la condición inicial $p_{x0,i}$, $q_{y0,i}$, $p_{z0,i}$ del conjunto de todas las condiciones iniciales I , que resuelve el sistema semiclásico (3.1)-(3.5) para obtener la velocidad de grupo $v_{x,i}$.

En [11] se calcula la velocidad *drift* a un ángulo e intensidad magnética de $\theta = 40^\circ$ y $B = 15\text{T}$ respectivamente, donde para ciertos valores del campo eléctrico aparecen máximos relativos adicionales en el perfil $v_d - F$ acompañados por lo tanto de regiones de velocidad diferencial negativa (NDV en sus siglas en inglés). A partir de la ecuación del oscilador armónico forzado (3.6) se deduce que cuando $\theta = 0^\circ$ el movimiento ciclotrónico es separable del movimiento de Bloch. Pero cuando $\theta \neq 0^\circ$ se produce un acoplamiento no lineal entre los dos tipos de movimiento. En particular, para los valores del voltaje en los que el cociente

$$r = \frac{\omega_B}{\omega_c}$$

es un entero, las frecuencias de Bloch y ciclotrónicas entran en fuerte resonancia generando máximos adicionales en el perfil $v_d - F$ [20]. Estos picos tendrán asociados regiones adicionales de NDV que inducirán dinámicas de propagación de dominios de carga intrincados (calculados usando el modelo explicado en la siguiente sección) a través de la superred [11, 27]. En [23] se muestra que no es hasta intensidades magnéticas iguales o superiores a $B = 8\text{T}$ cuando aparecen tales picos en el perfil $v_d - F$.

3.2.3 Modelo para el transporte de carga

En los trabajos [11, 23, 27], la dinámica electrónica del dispositivo físico es simulada numéricamente mediante un modelo espacialmente unidimensional donde las ecuaciones a integrar se toman con dimensiones. La muestra se discretiza en N_x nodos (en los trabajos [11, 27] se explicita que $N_x = 480$) en un mallado uniforme con paso internodal $\Delta x = L/N_x$, donde L es la longitud de la muestra sin los contactos, i.e., el número de periodos, $N = 14$, por la longitud de cada uno, $l = 14\text{nm}$. A cada nodo x_i , $i = 1, \dots, N_x$, se le asigna la densidad electrónica volumétrica n_i . Si interpretamos que cada nodo representa una celda de longitud Δx , entonces a cada lado de la celda x_i se puede asociar las interfases para los campos eléctricos F_i y F_{i+1} (ver figura 3.1). Cada contacto tiene longitud $c = 50\text{nm}$. En el contacto inyector se definen dos regiones: una situada en el extremo más a la izquierda de longitud $c - s$ en el que se le asigna un campo constante F_0 , y luego otra llamada de acumulación de carga de longitud $s = 15\text{nm}$. De la misma manera, en el contacto colector se define una región de merma de carga inmediatamente a la derecha de F_{N_x+1} de longitud q variable y otra hasta el final de la muestra de campo constante F_0 de longitud $c - q$.

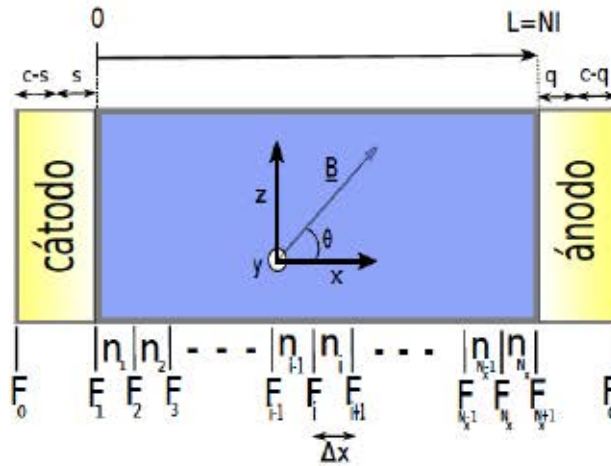


Figura 3.1: Esquema discretizado de la superred utilizado en [11, 23, 27]. El dispositivo se divide en N_x celdas más los contactos. A cada celda x_i se le asocia la densidad volumétrica n_i y en los lados a izquierda y derecha los campos eléctricos F_i y F_{i+1} .

Las ecuaciones a resolver en cada celda son: la ecuación de continuidad para la evolución de la densidad de carga n_i y la ley de Gauss en su forma

diferencial para el campo eléctrico F_i :

$$e \frac{dn_i}{dt} + \frac{J_i - J_{i-1}}{\Delta x} = 0, \quad (3.14)$$

$$\frac{F_{i+1} - F_i}{\Delta x} = \frac{e}{\varepsilon} (n_i - n_D), \quad i = 1, \dots, N_x, \quad (3.15)$$

donde ε es la constante dieléctrica (producto de la permitividad absoluta y relativa) y J_i es la densidad de corriente. El dopaje de la muestra, n_D , se considera constante en general, con la excepción de [23], en el que en cada nodo x_i se considera

$$n_{Di} = n_D \exp \left(-\frac{2F_{ion}}{F(i) + F(i+1)} \right), \quad (3.16)$$

donde $F_{ion} = 150 \text{ KVm}^{-1}$ es el campo característico debido a los donantes ionizados del dopaje.

La densidad de corriente J_i es el flujo de electrones moviéndose del nodo x_i al x_{i+1} y está definida por

$$J_i = en_i v_i, \quad i = 1, \dots, N_x. \quad (3.17)$$

El modelo no considera término difusivo en la densidad de corriente debido a la baja temperatura de la superred ($T = 4.2\text{K}$). Para temperaturas altas del dispositivo, se pueden considerar las referencias [28] con $T = 200\text{K}$ y [25] para la SL a temperatura ambiente, donde en este último trabajo se incluye un término difusivo en la descripción de la densidad de corriente.

La densidad de corriente J_i depende directamente de la velocidad *drift* v_i , y ésta a su vez de las ecuaciones del movimiento semiclásico del electrón (3.1)-(3.5) teniendo en cuenta las colisiones entre electrones o *scattering* mediante la aproximación de Esaki-Tsu [18] (en la subsección (3.2.2) se detalla cómo se obtiene dicha velocidad). Por lo tanto, la velocidad *drift* dependerá indirectamente de los campos eléctrico y magnético y de la inclinación de este último, todo ello vía la velocidad *semiclásica* v_x obtenida mediante la resolución del sistema (3.1)-(3.5):

$$v_i = v(v_x(\bar{F}_i, B, \theta)). \quad (3.18)$$

El campo promedio \bar{F}_i se obtiene de distintas maneras según autores. En [23] el campo promedio se considera como la media de los vecinos de cada densidad de carga n_i ,

$$\bar{F}_i = \frac{F_i + F_{i+1}}{2}, \quad (3.19)$$

mientras que en [27] se hace el promedio sobre un entorno de n_i a una distancia de un periodo de longitud d ,

$$\bar{F}_i = \frac{1}{N_p} \sum_{i-N_p/2}^{i+N_p/2} F_i, \quad (3.20)$$

donde N_p es el número de nodos que hay en un período.

La inyección de corriente en el cátodo es simulada mediante la condición óhmica

$$J_0 = \sigma F_1, \quad (3.21)$$

donde a partir del modelo de Drude se determina que la conductividad es

$$\sigma = \frac{e^2 \tau_c n_c}{m} \quad (3.22)$$

siendo $n_c = 10^{23} \text{m}^{-3}$, $\tau_c = 90 \text{fs}$ [23], el dopaje y el tiempo de scattering, respectivamente, en el contacto. Por otra parte, en el trabajo [26] se considera la conductividad dependiente del campo magnético,

$$\sigma(B) = \frac{\sigma_c}{1 + (\omega_c^* \tau_c \sin \theta)^2}, \quad (3.23)$$

donde $\omega_c^* = eB/m$, $\sigma_c = 3.8 \times 10^3 \Omega \text{m}^{-1}$ y $\tau_c = 90 \text{fs}$.

Las zonas de acumulación de carga y el resto del contacto inyector están separadas por una lámina de carga de densidad bidimensional variable, n_l , que sirve para la transición del campo constante F_0 al campo F_1 . Por lo tanto, esta lámina estará separada a una distancia s del primer pozo cuántico. La ecuación de Poisson da la relación para la densidad bidimensional n_l variable siguiente:

$$F_1 - F_0 = \frac{e}{\varepsilon} n_l. \quad (3.24)$$

De la misma manera, la ecuación de Poisson relaciona el campo F_{N_x+1} , a través de la zona de merma de carga, con el campo constante F_0 de la región extrema derecha del contacto mediante la densidad de dopaje en los contactos n_0 ,

$$\frac{F_0 - F_{N_x+1}}{q} = \frac{e}{\varepsilon} (-n_0), \quad (3.25)$$

donde despejando F_0 e integrando sobre la zona de merma de electrones nos da el voltaje V_c en dicha región:

$$V_c = q F_{N_x+1} - \frac{eq^2}{2\varepsilon} n_0. \quad (3.26)$$

El voltaje total del sistema se relaciona con el promedio del campo en cada nodo x_i , $(F_i + F_{i+1})/2$, con el campo en las regiones de los contactos salvo la zona de merma de electrones, donde se utiliza el voltaje V_c , y por último con un término que involucra el resto de componentes del circuito conectado a los contactos:

$$V = \frac{\Delta x}{2} \sum_{i=1}^{N_x} (F_i + F_{i+1}) + (c - s)F_0 + sF_1 + V_c + (c - q)F_0 + \sigma F_0 A R_{ext}, \quad (3.27)$$

donde A es el área de la sección transversal del dispositivo y $R_{ext} = 17 \text{ V/A}$ es la resistencia que describe la conexión entre la muestra y los diferentes componentes del circuito.

Las incógnitas del problema son los $N_x + 2$ campos locales, las N_x densidades de carga locales, la densidad bidimensional n_l y la distancia de la zona de merma de electrones q .

Cuando $\theta = 0^\circ$, las simulaciones realizadas en [11, 27] muestran dominios de carga viajeros típicos del efecto Gunn (donde el cálculo de la curva $v_d(F)$ presenta un único máximo relativo), dando a lugar a oscilaciones autosostenidas de la corriente. Cuando las frecuencias de Bloch y ciclotrónicas entran en resonancia, i.e., el cociente $r = \omega_B/\omega_c$ resulta ser entero y además las intensidades magnéticas son mayores a 8T (donde ahora la curva $v_d(F)$ tendrá varios máximos relativos adicionales), entonces se crean patrones más complicados tales como múltiples dominios de carga que al llegar al colector inducen varios picos en una misma oscilación de la corriente.

Este modelo simplifica la descripción bidimensional de la dinámica electrónica debida a la presencia de campos magnéticos usando una fundamentación en el modelo de Esaki-Tsu para el tratamiento de colisiones y una ecuación de transporte unidimensional para el cálculo de los dominios viajeros de carga y las oscilaciones autosostenidas de la corriente. En el siguiente capítulo se muestra un modelo más realista respecto a los términos de colisión y tomará en cuenta el carácter bidimensional de la dinámica electrónica, que es más acorde para la descripción del transporte electrónico en superredes bajo la acción de un campo magnético.

Capítulo 4

Descripción del modelo

Este capítulo presenta un modelo matemático basado en la teoría cinética para la descripción del transporte electrónico no lineal bajo la influencia de un campo magnético. La teoría cinética (y en concreto la ecuación de Boltzmann) está documentada en muchos manuales científicos donde se estudia la dinámica de los gases rarificados [32, 33]. Dichos gases contienen del orden de 10^{23} partículas que interactúan unas con otras, con lo que se debería resolver del orden de 10^{23} ecuaciones acopladas para determinar la ecuación del movimiento de cada una de ellas. Como esto no es abordable, para describir dicho gas se introduce la función de distribución o función de densidad f dependiente de la variable temporal y de las variables que definen el estado físico de las partículas. Dichas variables son la variable espacial y la de velocidad tridimensionales, \underline{x} y \underline{c} respectivamente en notación de [32], que definen todo el espacio físico. Por lo tanto la teoría cinética describe el estado del gas a través de la función de distribución $f(\underline{x}, \underline{c}, t)$ donde $N_{\underline{x}, \underline{c}, t} = f(\underline{x}, \underline{c}, t) d\underline{x} d\underline{c}$ da el número de partículas que ocupan una *celda* del espacio físico definida por las dimensiones $d\underline{x} d\underline{c}$ a tiempo t . Por lo tanto, $N_{\underline{x}, \underline{c}, t}$ es el número de partículas a tiempo t con velocidades en el rango de $\{\underline{c}, \underline{c} + d\underline{c}\}$ que se encuentran en el intervalo $\{\underline{x}, \underline{x} + d\underline{x}\}$.

Con todo esto, el estado del gas es conocido cuando es conocida su función de distribución $f(\underline{x}, \underline{c}, t)$. Calculando los momentos de la función de distribución se puede conocer el número de partículas en todo el volumen, la densidad de estas partículas o su velocidad promedio. Por ejemplo, si integramos la función de distribución sobre todo el espacio velocidad obtendremos su densidad n

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\underline{c} f. \quad (4.1)$$

La analogía entre la teoría matemática de los procesos de transporte en gases

y el transporte electrónico es clara. En este capítulo se desarrollará un modelo matemático donde la función de distribución *electrónica* dependerá de las variables espaciales $\underline{r} = (x, y, x)$ y de las variables que conforman el espacio de los momentos $\underline{k} = (k, k_y, k_z)$. Un extenso tratamiento sobre técnicas matemáticas acerca del transporte electrónico no lineal se puede encontrar en Bonilla et al [34].

Una propiedad electrónica que se puede encontrar experimentalmente en superredes semiconductoras bajo ciertas condiciones son oscilaciones estacionarias de la corriente debidas a la formación repetida de pulsos del campo eléctrico que viajan hacia el colector [7]. Teóricamente, aunque muchas cualidades del transporte electrónico pueden ser estudiadas ignorando los efectos espaciales de la carga, el estudio de estas oscilaciones autosostenidas de la corriente requieren tomar en consideración dichos efectos espaciales. Para ello basta acoplar a la ecuación que da la evolución en el tiempo de la función de distribución, llamada a partir de ahora *ecuación cinética*, la ecuación de Poisson para el potencial eléctrico. Desde 1970 se han propuesto modelos matemáticos basados en la ecuación de transporte electrónico de Boltzmann, donde el primero de todos se debe a Ktitorov, Simin y Sindalovskii [35] en 1971. No fue hasta 2003 cuando Bonilla et al [2] incluyeron los efectos espaciales de la carga hallando soluciones numéricas con oscilaciones autosostenidas estables de la corriente.

El modelo que describimos en este capítulo amplía el estudio del transporte electrónico no lineal a superredes bajo la influencia de un campo magnético a partir de la ecuación cinética, la cual contendrá un término de colisiones de tipo Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) [1].

4.1 Ecuaciones BGK

La ecuación Boltzmann da la probabilidad de que un estado esté ocupado. Tal como se ha dicho antes, esta distribución de probabilidad $f(\underline{r}, \underline{k}, t)$ reside en el espacio de fase de las variables \underline{r} y \underline{k} . Nos interesará conocer su evolución en el tiempo, esto es

$$\frac{df(\underline{r}, \underline{k}, t)}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{d\underline{r}}{dt} \frac{\partial}{\partial \underline{r}} + \frac{d\underline{k}}{dt} \frac{\partial}{\partial \underline{k}} \right) f(\underline{r}, \underline{k}, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} f(\underline{r}, \underline{k}, t) \right)_{|COL} \quad (4.2)$$

Como en (4.1), la siguiente relación nos da la densidad electrónica tridimensional a partir de la integración de la función de distribución sobre el espacio de los momentos:

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y dk_z f, \quad (4.3)$$

donde la función f es $2\pi/l$ periódica en la componente k . Cabe decir que n es una densidad tridimensional, las dimensiones de \underline{k} es m^{-3} y que por lo tanto f y f^B no tienen dimensiones.

En el desarrollo de la ecuación (4.2), el término de la derecha representa el término de colisiones [2, 36, 37]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} f \right)_{|_{\text{col}}} = -\nu_e(f - f^B) - \nu_p \mathcal{A}f, \quad (4.4)$$

donde el primer término de colisión de (4.4) representa la aproximación de tiempo de relajación que tiende a restaurar el equilibrio descrito por la distribución de equilibrio local de Boltzmann bidimensional cada vez que ocurra un proceso de *scattering* (debido, por ejemplo, a las colisiones inelásticas de los fonones) con una frecuencia ν_e tomada por simplicidad como constante (un modelo similar fue propuesto por Ignatov y Shashkin [38, 39]). El segundo término es debido a la frecuencia de colisión elástica ν_p ¹, también tomada constante, donde $\mathcal{A}f = 1/2(f(\underline{r}, \underline{k}, t) - f(\underline{r}, -\underline{k}, t))$ [2, 7, 35]. Este último tipo de colisiones, que conservan la energía y solo cambian el momento de los electrones, es debido a las impurezas de la superred causadas por átomos dopantes que deforman el potencial periódico. Para una descripción más detallada de este último término de colisión elástico consultar [40].

Conviene recordar el sistema reducido (2.31-2.34) desarrollado en el capítulo (2) de las ecuaciones semiclásicas del movimiento del electrón:

$$\dot{x} = \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin kl, \quad (4.5)$$

$$\dot{z} = \frac{\hbar}{m} k_z, \quad (4.6)$$

$$\hbar \dot{k} = eF - \frac{eB}{m} \hbar k_y \sin \theta, \quad (4.7)$$

$$\hbar \dot{k}_z = eF_z + \frac{eB}{m} \hbar k_y \cos \theta, \quad (4.8)$$

donde

$$k_y = \frac{eB}{\hbar} (x \sin \theta - z \cos \theta), \quad (4.9)$$

los campos eléctrico $\underline{F} = (F, F_y, F_z)$ y magnético $\underline{B} = (B \cos \theta, 0, B \sin \theta)$ y Δ, l, θ, \hbar y m la energía de la minibanda, la longitud del período, el ángulo entre el campo magnético y el eje de crecimiento de la superred, la constante

¹Las frecuencias ν_e y ν_p tienen su equivalencia en el inverso de los tiempos de *scattering* $1/\tau_i$ y $1/\tau_e$, respectivamente, de los trabajos citados en el capítulo 3

de Planck y la masa del electrón respectivamente. Sustituyendo los términos de colisiones (4.4) y el sistema (4.5-4.8) en (4.2) obtenemos

$$\begin{aligned} & \left(\partial_t + \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin kl \partial_x + \frac{\hbar k_z}{m} \partial_z + e \left(\frac{F}{\hbar} - \frac{B}{m} k_y \sin \theta \right) \partial_k \right. \\ & \left. + e \left(\frac{F_z}{\hbar} + \frac{B}{m} k_y \cos \theta \right) \partial_{k_z} + \nu_e + \nu_p A \right) f = \nu_e f^B. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Utilizamos las propiedades de la función delta de Dirac para eliminar la dependencia de f sobre la variable k_y . Sea

$$f = \delta(k_y - \frac{eB}{\hbar}(x \sin \theta - z \cos \theta)) \frac{2\pi}{L_y} \tilde{f}(x, z, k, k_z, t), \quad (4.11)$$

donde L_y es la longitud del dispositivo en la dirección y . Entonces

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y dk_z f = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{L_y} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \tilde{f} \quad (4.12)$$

donde en el desarrollo de (4.12) se ha utilizado (4.11) y que $\int_{-\infty}^{\infty} dk_y \delta(k_y - (x \sin \theta - z \cos \theta) eB/\hbar) = 1$.

A partir de ahora se hará el uso de notación tomando $f(x, z, k, k_z, t) = \tilde{f}(x, z, k, k_z, t)$ por claridad.

La función de distribución f y la función de distribución en el equilibrio tiene la misma densidad electrónica para preservar la continuidad de la carga, tal como en los modelos de colisión BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) [1]. Por lo tanto,

$$n = \frac{2}{(2\pi)^2 L_y} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f = \frac{2}{(2\pi)^2 L_y} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f^B. \quad (4.13)$$

Un camino para hallar la función de distribución en el equilibrio local f^B es asumir que $f^B \propto \exp\{-E(\underline{k})/(K_B T)\}$ donde $E(\underline{k})$ es la relación de dispersión para la primera minibanda (2.21), K_B la constante de Boltzmann y T la temperatura de la superred. Sea A la constante de proporcionalidad, entonces de la relación (4.13) entre n y f^B se obtiene

$$n = \frac{2A_1}{(2\pi^2)L_y} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{(\Delta \cos kl - \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2) \frac{1}{2K_B T}} \quad (4.14)$$

donde $A_1 = A \exp\{(-k_y^2 \hbar^2/m - \Delta)/(2K_B T)\}$. De $f^B = A \exp\{-E(\underline{k})/(K_B T)\}$ y de la relación (4.14) se llega a que

$$f^B = \frac{n e^{(\frac{\Delta}{2} \cos kl - \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2) \frac{1}{K_B T}}}{\frac{2}{(2\pi)^2 L_y} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{(\Delta \cos kl - \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2) \frac{1}{2K_B T}}}. \quad (4.15)$$

Mediante la forma integral de las funciones de Bessel modificadas

$$I_j(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\alpha e^{\xi \cos \alpha} \cos j\alpha \quad (4.16)$$

se llega a la expresión de $f^B(k, k_y; n)$ siguiente:

$$f^B = \frac{\hbar l L_y}{I_0\left(\frac{\Delta}{2K_B T}\right)} \sqrt{\frac{\pi}{2m K_B T}} n e^{(\Delta \cos kl - \frac{\hbar^2}{m} k_z^2) \frac{1}{2K_B T}} \quad (4.17)$$

La relación para la densidad de corriente la obtenemos mediante la velocidad de grupo electrónica $\underline{v}(k, k_z) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k, k_z)}{\partial (k, k_z)}$ proveniente del sistema semi-clásico del movimiento electrónico y multiplicando por la unidad de carga e (donde $-e$ es la carga del electrón):

$$\underline{J}_n = \frac{2e}{(2\pi)^2 L_y} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \underline{v}(k, k_z) f \quad (4.18)$$

Para incluir los cambios espaciales en el potencial eléctrico $W(x, z, t)$ (y por tanto en el campo eléctrico) por acumulación de carga acoplamos la ecuación cinética a la ecuación de Poisson

$$\varepsilon (\partial_x^2 + \partial_z^2) W = e(n - N_D), \quad (4.19)$$

donde en el capítulo (2) se estableció que $\underline{F} = \nabla W$ es menos el campo eléctrico. ε y N_D son la constante dieléctrica y la densidad del dopaje respectivamente. El modelo de la ecuación cinética con los mismos términos de colisiones que se han visto junto con la ecuación de Poisson, sin la influencia de un campo magnético y utilizando una distribución de Fermi-Dirac unidimensional fue utilizado por primera vez por Bonilla, Escobedo y Perales [2]. Por último, inspeccionando la ecuación cinética 4.10 parece conveniente definir el siguiente cambio en el potencial eléctrico:

$$\Omega = W - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2em}, \quad (4.20)$$

con lo que el sistema BGK-Poisson con dimensiones queda:

$$\left(\partial_t + \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin kl \partial_x + \frac{\hbar k_z}{m} \partial_z + e \frac{\partial_x \Omega}{\hbar} \partial_k + e \frac{\partial_z \Omega}{\hbar} \partial_{k_z} + \nu_e + \nu_p \mathcal{A} \right) f = \nu_e f^B, \quad (4.21)$$

$$\varepsilon (\partial_x^2 + \partial_z^2) \Omega = e \left(n - N_D - \frac{\varepsilon B^2}{m} \right). \quad (4.22)$$

4.2 Transformaciones en la función de distribución

El objetivo de esta sección es reescribir la relación (4.18) de la densidad de corriente \underline{J}_n en función de las transformadas de Fourier de la función de distribución f . Como f es $2\pi/l$ periódica en la componente k , entonces

$$f(k, k_z) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ijkl} f_j(k_z). \quad (4.23)$$

A su vez f_j viene definida por la transformada continua de Fourier

$$f_j(k_z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{ik_z\zeta} \hat{f}_j(\zeta) \quad (4.24)$$

con lo que

$$f(k, k_z) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{ijkl + ik_z\zeta} \hat{f}_j(\zeta), \quad (4.25)$$

donde el coeficiente $\hat{f}_j(\zeta)$ viene definido por

$$\hat{f}_j(\zeta) = \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} e^{-ijkl - ik_z\zeta} f(k, k_z). \quad (4.26)$$

Además también se utilizará en la siguiente sección que

$$i\partial_{\zeta} \hat{f}_j(\zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} k_z e^{-ik_z\zeta} f_j(k_z). \quad (4.27)$$

Notar que de (4.13) obtenemos

$$\hat{f}_0(0) = \frac{l}{2} L_y n = \hat{f}_0^B(0). \quad (4.28)$$

4.2.1 Densidades de corriente y ecuaciones de los momentos

Calculamos por separado las componentes de la forma vectorial de la densidad de corriente $\underline{J}_n = (J_{nx}, J_{nz})$ de (4.18) considerando las relaciones (4.5) y (4.6) para la velocidad de grupo, donde se tiene en cuenta que

$f_j(k_z) = \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk f e^{-ijk_l}$ de (4.26) y la relación $\sin \phi = (e^{i\phi} - e^{-i\phi})/(2i)$

en el siguiente desarrollo:

$$\begin{aligned} J_{nx} &= \frac{2e}{(2\pi)^2 L_y} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin kl f = \frac{e\Delta}{2\hbar\pi L_y} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \sin kl f \\ &= \frac{e\Delta}{2\hbar\pi L_y} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \frac{e^{ikl} - e^{-ikl}}{2i} f = \frac{e\Delta}{2i\hbar L_y} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} (f_{-1} - f_1) \\ &= \frac{e\Delta}{2i\hbar L_y} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} (\text{Re} f_1 - i\text{Im} f_1 - \text{Re} f_1 - i\text{Im} f_1) = -\frac{e\Delta}{\hbar L_y} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} \text{Im} f_1. \end{aligned}$$

Finalmente utilizando (4.26) se obtiene

$$J_{nx} = -\frac{e\Delta}{\hbar L_y} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} e^{-ik_z 0} \text{Im} f_1 = -\frac{e\Delta}{\hbar L_y} \widehat{\text{Im} f_1}(0). \quad (4.29)$$

De manera análoga para la componente z de la densidad de corriente \underline{J}_n ,

$$\begin{aligned} J_{nz} &= \frac{2e}{(2\pi)^2 L_y} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\hbar k_z}{m} f = \frac{2e\hbar}{m2\pi L_y l} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z k_z \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk e^{-ik_0} f \\ &= \frac{2e\hbar}{mL_y l} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} e^{-ik_z 0} f_0(k_z) k_z \end{aligned}$$

y utilizando también (4.27) se llega a

$$J_{nz} = \frac{2ie\hbar}{mlL_y} \partial_\zeta \widehat{f}_0(0). \quad (4.30)$$

Para obtener la ecuación del momento para la densidad electrónica n integramos sobre \underline{k} la ecuación cinética 4.21, y consideramos (4.18):

$$e\partial_t n + \nabla_{\underline{x}} \cdot \underline{J}_n = 0. \quad (4.31)$$

Podemos eliminar la presencia de la densidad electrónica de esta ecuación diferencial utilizando la ecuación de Poisson (4.22) e integrando el resultado sobre el vector espacial $\underline{x} = (x, z)$, obteniendo la ley de Ampère

$$\varepsilon \partial_t \underline{F} + \underline{J}_n = \underline{J}. \quad (4.32)$$

Al vector $\underline{J} = (J_x, J_z)$ lo llamaremos densidad de corriente total que además satisface la ecuación diferencial de la divergencia nula

$$\nabla_{\underline{x}} \cdot \underline{J} = 0. \quad (4.33)$$

La ley de transporte (4.31) o la ley de Ampère 4.32 tienen como una de las variables dependientes la densidad de corriente \underline{J}_n , la cual tiene dimensiones de *flujo electrónico* ($\text{C}/(\text{m}^2\text{s})$). Para obtener dicho flujo es necesario utilizar las relaciones (4.29) y (4.30) y por tanto calcular la función de distribución f , que es solución de la ecuación cinética.

4.3 Balance dominante

El sistema de Boltzmann-Poisson (4.21)-(4.22) no puede ser resuelto analíticamente y la resolución numérica es demasiado costosa debido al número de variables. Para obtener una ecuación diferencial reducida de la función de distribución debemos asumir que la contribución del campo eléctrico en la ecuación cinética es comparable a los términos de colisión y que estos términos dominan los otros términos espaciales y temporales. Este límite distinguido es el llamado *límite hiperbólico* [34]. De acuerdo con esto, podemos obtener las escalas características (ver tabla (4.1)) para hallar una versión adimensionalizada de la ecuación cinética donde δ será un parámetro pequeño definido por el cociente del recorrido libre medio entre colisiones y el tiempo que le toma a un electrón para atravesar una distancia que involucre una variación del campo eléctrico [34, 40, 41]. Para aproximar la solución de la ecuación cinética utilizaremos el método perturbativo de Chapman-Enskog [34, 42]. En esta técnica expandiremos la función de distribución en potencias del parámetro pequeño δ .

n	F	\mathcal{E}, μ	v_x	v_z
$N_D + \frac{\varepsilon B^2}{m}$	$\frac{\hbar \nu_e \tau_e}{el}$	Δ	$\frac{\Delta I_1}{4\hbar I_0 \tau_e}$	$\frac{\hbar \tau_e}{ml}$
$38.5422 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$	$4.4994 \frac{\text{kV}}{\text{cm}}$	19 meV	$6.90258 \frac{\text{km}}{\text{s}}$	$1771.7 \frac{\text{km}}{\text{s}}$

x	z	t
$\frac{\varepsilon[F]}{e[n]}$	$[t][v_z]$	$\frac{[x]}{[v_x]}$
0.80642 nm	$0.207 \mu\text{m}$	0.117 ps

Tabla 4.1: Escalamiento hiperbólico, donde $\tau_e = \sqrt{1 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}$. Los valores numéricos están tomados del artículo Nature [20].

Sea

$$\mathcal{Q}_x = \frac{el}{\nu_e \tau_e \hbar} \partial_x \Omega = \frac{el(F - \frac{B}{m} \hbar k_y \sin \theta)}{\hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}}, \quad (4.34)$$

$$\mathcal{V}_z = \frac{e}{m \nu_e} \partial_z \Omega = \frac{e}{m \nu_e} (F_z + \frac{B}{m} \hbar k_y \cos \theta) \quad (4.35)$$

donde $\tau_e = \sqrt{1 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}$ y $\nu_e \tau_e = \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}$. Entonces utilizando la tabla (4.1) para adimensionalizar la ecuación cinética se obtiene

$$\left(\frac{[v_x]}{[x]\nu_e\tau_e} \left(\partial_{\hat{t}} + \hat{v}(k)\partial_{\hat{x}} + \hat{v}(k_z)\partial_{\hat{z}} \right) + \hat{Q}_x \partial_{\hat{k}} + \hat{V}_z \partial_{\hat{k}_z} + \frac{1}{\tau_e} + \frac{\nu_p}{\nu_e\tau_e} \mathcal{A} \right) f = \frac{1}{\tau_e} f^B, \quad (4.36)$$

donde el símbolo $\hat{\cdot}$ denota una variable adimensionalizada y el parámetro es $\delta = \frac{[v_x]}{[x]\nu_e\tau_e}$.

Utilizamos la expansión de Chapman-Enskog [34] para expandir la función de distribución en potencias del parámetro δ :

$$f(x, z, k, k_z; \delta) = f^{(0)}(k, k_z; n) + \sum_{m=1}^{\infty} f^{(m)}(k, k_z; n) \delta^m, \quad (4.37)$$

$$\partial_t n = \sum_{m=0}^{\infty} N^{(m)}(n) \delta^m. \quad (4.38)$$

Los coeficientes $f^{(m)}$ dependen de las *variables lentas* x , z y t a través de su dependencia en la densidad electrónica. Para encontrar las ecuaciones que definen los coeficientes $f^{(m)}$, insertamos la expansión en la ecuación cinética e igualamos en potencias de δ . Por lo tanto para orden cero u orden principal se tiene que

$$\left[Q_x \frac{\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}}{l} \partial_k + \frac{mV_z}{\hbar} \nu_e \partial_{k_z} + \nu_e + \nu_p \mathcal{A} \right] f^{(0)} = \nu_e f^B. \quad (4.39)$$

Para las demás potencias se tiene la siguiente jerarquía:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} f^{(1)} &= -(\partial_t + v(k)\partial_x + v(k_z)\partial_z) f^{(0)}|_0 \\ \mathcal{L} f^{(2)} &= -(\partial_t + v(k)\partial_x + v(k_z)\partial_z) f^{(1)}|_1 - \partial_t f^{(0)}|_1, \dots, \end{aligned} \quad (4.40)$$

donde

$$\mathcal{L} u(k, k_z) \equiv \left(\frac{\nu_e \tau_e}{l} Q_x \partial_k + \frac{m\nu_e}{\hbar} V_z \partial_{k_z} + \nu_e + \frac{\nu_p}{2} \right) u - \frac{\nu_p}{2} u(-k, k_z)$$

y donde los subíndices indican qué términos de la segunda ecuación del *ansatz* (4.38) se sustituyen en la ecuación cinética (4.21).

4.4 Orden principal de la función de distribución f

Para calcular las densidades de corriente a orden cero $J_{nx}^{(0)}$ y $J_{nz}^{(0)}$ a partir de (4.29) y (4.30 respectivamente necesitamos las expresiones de $\widehat{f_0^{(0)}}(0)$ y $\widehat{Im f_1^{(0)}}(0)$ (donde ahora el símbolo $\widehat{}$ denota la transformación de Fourier). En esta sección calcularemos las expresiones de $\widehat{Re f_j^{(0)}}$ y $\widehat{Im f_j^{(0)}}$ en términos de f^B (ya que f^B es conocida) para luego obtener $\widehat{Re f_j^{(0)}}$ y $\widehat{Im f_j^{(0)}}$. Como la función de distribución f es $2\pi/l$ periódica en k podemos expandirla en su serie de Fourier

$$f^{(0)}(k, k_z; n) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} f_j^{(0)}(k_z; n) e^{ijkl}. \quad (4.41)$$

Como \mathcal{Q}_x y \mathcal{V}_z de (4.39) son independientes de k y k_z y además se tiene que $\nu_p \mathcal{A} f_j^{(0)} = \frac{\nu_p}{2} f_j^{(0)} - \frac{\nu_p}{2} f_{-j}^{(0)}$, entonces sustituyendo (4.41) en (4.39), tomando también la serie de Fourier de la función en el equilibrio f^B y tratando cada término j de la serie por separado se llega a que

$$\left(\mathcal{Q}_x \frac{\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}}{l} ijl + \frac{m\mathcal{V}_z}{\hbar} \nu_e \partial_{k_z} + \nu_e + \frac{\nu_p}{2} \right) f_j^{(0)} - \frac{\nu_p}{2} f_{-j}^{(0)} = \nu_e f_j^B. \quad (4.42)$$

A partir de ahora $f_j^{(0)} = Re(f_j^{(0)}) + i Im(f_j^{(0)})$ y $f_j^B = Re(f_j^B) + i Im(f_j^B)$. Sea

$$\begin{aligned} a &= \mathcal{Q}_x \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)} j, \\ b &= \frac{m\mathcal{V}_z}{\hbar} \nu_e \partial_{k_z} + \nu_e + \frac{\nu_p}{2}, \\ c &= -\frac{\nu_p}{2}, \\ d &= \nu_e. \end{aligned}$$

Notar que $f_{-j}^{(0)} = f_j^{(0)*}$ (i.e., $Re(f_{-j}^{(0)}) + i Im(f_{-j}^{(0)}) = Re(f_j^{(0)}) - i Im(f_j^{(0)})$) implica que

$$\begin{aligned} (ai + b) \left(Re(f_j^{(0)}) + i Im(f_j^{(0)}) \right) + c(Re(f_j^{(0)}) - i Im(f_j^{(0)})) \\ = d(Re(f_j^B) + i Im(f_j^B)), \end{aligned}$$

con lo que

$$\begin{aligned} -a \operatorname{Im}(f_j^{(0)}) + b \operatorname{Re}(f_j^{(0)}) + c \operatorname{Re}(f_j^{(0)}) &= d \operatorname{Re}(f_j^B), \\ a \operatorname{Re}(f_j^{(0)}) + b \operatorname{Im}(f_j^{(0)}) - c \operatorname{Im}(f_j^{(0)}) &= d \operatorname{Im}(f_j^B). \end{aligned}$$

Entonces

$$\left(\frac{m\nu_e}{\hbar} \mathcal{V}_z \partial_{k_z} + \nu_e \right) \operatorname{Re} f_j^{(0)} - j \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)} \mathcal{Q}_x \operatorname{Im} f_j^{(0)} = \nu_e \operatorname{Re} f_j^B, \quad (4.43)$$

$$\left(\frac{m\nu_e}{\hbar} \mathcal{V}_z \partial_{k_z} + \nu_e + \nu_p \right) \operatorname{Im} f_j^{(0)} + j \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)} \mathcal{Q}_x \operatorname{Re} f_j^{(0)} = \nu_e \operatorname{Im} f_j^B. \quad (4.44)$$

Para poder despejar $\operatorname{Re}(f_j^{(0)})$ y $\operatorname{Im}(f_j^{(0)})$ definimos los operadores

$$D_e = \frac{m\nu_e}{\hbar} \mathcal{V}_z \partial_{k_z} + \nu_e, \quad D_p = \frac{m\nu_e}{\hbar} \mathcal{V}_z \partial_{k_z} + \nu_e + \nu_p. \quad (4.45)$$

Si multiplicamos D_p por la ecuación (4.43), $\mathcal{Q}_x j \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}$ por la ecuación (4.44) y hacemos su suma obtenemos que

$$\begin{aligned} D_p D_e \operatorname{Re} f_j^{(0)} + j^2 \mathcal{Q}_x^2 \left(\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)} \right)^2 \operatorname{Re} f_j^{(0)} \\ = \nu_e D_p \operatorname{Re} f_j^B + \nu_e j \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)} \mathcal{Q}_x \operatorname{Im} f_j^B. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Definimos otro operador

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &= D_p D_e + j^2 \mathcal{Q}_x^2 \nu_e(\nu_e + \nu_p) \\ &= \frac{m^2 \nu_e^2 \mathcal{V}_z^2}{\hbar^2} \partial_{k_z}^2 + (2\nu_e + \nu_p) \frac{m\nu_e}{\hbar} \mathcal{V}_z \partial_{k_z} + \nu_e(\nu_e + \nu_p)(1 + j^2 \mathcal{Q}_x^2) \\ &= \frac{m^2 \nu_e^2 \mathcal{V}_z^2}{\hbar^2} \partial_{k_z}^2 + \frac{\nu_e(2\nu_e + \nu_p)}{\hbar} m \mathcal{V}_z \partial_{k_z} + \nu_e(\nu_e + \nu_p)(1 + \mathcal{Q}_x^2 j^2), \end{aligned} \quad (4.47)$$

y obtenemos de (4.46)

$$\mathcal{D} \operatorname{Re} f_j^{(0)} = \nu_e D_p \operatorname{Re} f_j^B + \nu_e \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)} j \mathcal{Q}_x \operatorname{Im} f_j^B, \quad (4.48)$$

con lo que ya tenemos una relación explícita de $\operatorname{Re} f_j^{(0)}$ dependiente de la función en el equilibrio f^B .

Por otra parte, si multiplicamos D_e por la ecuación (4.44), $Q_x j \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}$ por la ecuación (4.43) y hacemos su resta obtenemos

$$\mathcal{D} \text{Im} f_j^{(0)} = \nu_e D_e \text{Im} f_j^B - \nu_e \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)} j Q_x \text{Re} f_j^B. \quad (4.49)$$

Ahora aplicamos la transformada de Fourier para obtener $\widehat{\text{Re} f_j^{(0)}}$ y $\widehat{\text{Im} f_j^{(0)}}$. De (4.48) y utilizando que la transformada de $\partial_{k_z} f_j(k_z)$ es $i\zeta \widehat{f_j}(\zeta)$ obtenemos

$$\widehat{\text{Re} f_j^{(0)}} = \frac{\nu_e(\nu_e + \nu_p + \frac{m\nu_e}{\hbar} \mathcal{V}_z i\zeta) \widehat{\text{Re} f_j^B} + \nu_e \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)} j Q_x \widehat{\text{Im} f_j^B}}{\nu_e(\nu_e + \nu_p)(1 + j^2 Q_x^2) + \frac{i}{\hbar} \nu_e(2\nu_e + \nu_p) m \mathcal{V}_z \zeta - \frac{m^2 \nu_e^2 \mathcal{V}_z^2}{\hbar^2} \zeta^2} \quad (4.50)$$

y entonces

$$\widehat{\text{Re} f_j^{(0)}} = \frac{\left(1 + i \frac{m}{\hbar(\nu_e + \nu_p)} \nu_e \mathcal{V}_z \zeta\right) \widehat{\text{Re} f_j^B} + \sqrt{\frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p}} j Q_x \widehat{\text{Im} f_j^B}}{1 + j^2 Q_x^2 + i \frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta - \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \left(\frac{m \mathcal{V}_z \zeta}{\hbar}\right)^2}. \quad (4.51)$$

Análogamente de (4.49) obtenemos

$$\widehat{\text{Im} f_j^{(0)}} = \frac{\left(\frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} + i \frac{m\nu_e}{\hbar(\nu_e + \nu_p)} \mathcal{V}_z \zeta\right) \widehat{\text{Im} f_j^B} - \sqrt{\frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p}} j Q_x \widehat{\text{Re} f_j^B}}{1 + j^2 Q_x^2 + i \frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta - \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \left(\frac{m \mathcal{V}_z \zeta}{\hbar}\right)^2} \quad (4.52)$$

y finalmente tenemos $\widehat{f_j^{(0)}}$ directamente en términos de $\widehat{f_j^B}$.

Ahora calculamos explícitamente la transformada de Fourier de f_j^B . De la ecuación (4.17) separamos del argumento de la exponencial la parte dependiente de la variable k , i.e., $f^B = h^B(k_z) g^B(k)$, y aplicamos a $g^B(k) = \exp(\Delta \cos kl / (2K_B T))$ su serie de Fourier,

$$g^B = \sum_{j=-\infty}^{\infty} g_j^B e^{ijkl}, \quad \text{con} \quad g_j^B = \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk e^{\frac{\Delta \cos kl}{2K_B T}} e^{-ijkl}. \quad (4.53)$$

Utilizando la forma integral de las funciones de Bessel modificadas (4.16) se llega a que

$$g_j^B = I_j \left(\frac{\Delta}{2K_B T} \right), \quad (4.54)$$

con lo que $f^B = h^B g^B$ queda

$$f^B = \frac{\hbar l L_y}{I_0} \sqrt{\frac{\pi}{2mK_B T}} n e^{-\frac{\hbar^2}{2mK_B T} k_z^2} I_j \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ijkl}. \quad (4.55)$$

Nos quedamos con

$$f_j^B(k_z) = \sqrt{\frac{\pi}{2mK_B T}} \frac{\hbar l L_y I_j}{I_0} n e^{-\frac{\hbar^2}{2mK_B T} k_z^2}. \quad (4.56)$$

Calculamos $\widehat{f_j^B}$ aplicando la transformada continua de Fourier a f_j^B , i.e., $\widehat{f_j^B}(\zeta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f_j^B(k_z) e^{-i\zeta k_z} dk_z$. Entonces

$$\widehat{f_j^B} = \frac{l L_y I_j}{I_0} n \frac{\hbar \sqrt{\pi}}{\sqrt{2mK_B T}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} e^{-\frac{\hbar^2 k_z^2}{2mK_B T} - i\zeta k_z}.$$

Utilizamos el cambio de variable $k_z^2 = \frac{2mK_B T}{\hbar^2} \sigma^2$, $\frac{\sqrt{2mK_B T}}{\hbar} d\sigma = dk_z$ con lo que obtenemos

$$\widehat{f_j^B} = \frac{l L_y I_j n}{I_0} \frac{\sqrt{\pi}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma e^{-\sigma^2 - \zeta \frac{\sqrt{2mK_B T}}{\hbar} \sigma} = \frac{l L_y I_j n}{2I_0} e^{-\frac{2mK_B T}{4\hbar^2} \zeta^2}.$$

Finalmente

$$\widehat{f_j^B} = \frac{l L_y I_j}{2I_0} n e^{-\frac{mK_B T}{2\hbar^2} \zeta^2} \quad (4.57)$$

que solo tiene parte real.

Volviendo a las relaciones (4.51)-(4.52) obtenemos

$$\widehat{Re f_j^{(0)}} = \frac{\frac{l L_y n I_j}{2I_0} \left(1 + i \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta \right) e^{-\frac{mK_B T}{2\hbar^2} \zeta^2}}{1 + j^2 Q_x^2 + i \frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta - \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \left(\frac{m \mathcal{V}_z \zeta}{\hbar} \right)^2}, \quad (4.58)$$

$$\widehat{Im f_j^{(0)}} = -\frac{l L_y I_j}{2I_0} n \sqrt{\frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p}} j Q_x \frac{e^{-\frac{mK_B T}{2\hbar^2} \zeta^2}}{1 + j^2 Q_x^2 + i \frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta - \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \left(\frac{m \mathcal{V}_z \zeta}{\hbar} \right)^2}, \quad (4.59)$$

con lo que ya somos capaces de obtener las densidades de corriente a orden principal.

4.5 Orden principal de la densidad de corriente

De

$$J_{nx} = J_{nx}^{(0)} + \delta J_{nx}^{(1)} + \delta^2 J_{nx}^{(2)} \dots, \quad (4.60)$$

$$J_{nz} = J_{nz}^{(0)} + \delta J_{nz}^{(1)} + \delta^2 J_{nz}^{(2)} \dots, \quad (4.61)$$

calculamos los términos $J_{nx}^{(0)}$, $J_{nz}^{(0)}$ a partir de la relaciones (4.29), (4.30) y sustituyendo (4.59), (4.58) respectivamente, con lo que directamente llegamos a que

$$J_{nx}^{(0)} = \frac{e\Delta l I_1}{2\hbar I_0 \sqrt{1 + \nu_p/\nu_e}} n \frac{Q_x}{1 + Q_x^2}, \quad (4.62)$$

y calculando $\partial_\zeta \hat{f}_0(0)$ obtenemos

$$J_{nz}^{(0)} = e n \mathcal{V}_z. \quad (4.63)$$

Por lo tanto, considerando los flujos electrónicos $J_{nx}^{(0)}$ y $J_{nz}^{(0)}$ obtenemos una versión a orden principal de las ecuaciones diferenciales (4.31)-(4.33).

4.6 Términos a primer orden

Vamos a calcular las correcciones a primer orden de la función de distribución f de la expansión de Chapman-Enskog (4.37). Si insertamos dicha expansión en la ecuación cinética e igualamos en potencias de δ , entonces para la potencia a primer orden obtenemos

$$\begin{aligned} & \left(\partial_t|_0 + \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin kl \partial_x + \frac{\hbar k_z}{m} \partial_z \right) f^{(0)} + \\ & \left(Q_x \frac{\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}}{l} \partial_k + \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \nu_e \partial_{k_z} + \nu_e + \nu_p \mathcal{A} \right) f^{(1)} = 0. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Si etiquetamos

$$r^{(1)} = - \left(\partial_t|_0 + \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin kl \partial_x + \frac{\hbar k_z}{m} \partial_z \right) f^{(0)} \quad (4.65)$$

obtenemos entonces la misma estructura que en (4.39):

$$\left(Q_x \frac{\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}}{l} \partial_k + \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \nu_e \partial_{k_z} + \nu_e + \nu_p \mathcal{A} \right) f^{(1)} = r^{(1)}.$$

De manera equivalente a la obtención de (4.51) y (4.52), obtenemos respectivamente

$$\widehat{Re f_j^{(1)}} = \frac{1}{\nu_e} \frac{\left(1 + i \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta\right) \widehat{Re r_j^{(1)}} + \frac{j \mathcal{Q}_x}{\sqrt{1 + \nu_p/\nu_e}} \widehat{Im r_j^{(1)}}}{1 + j^2 \mathcal{Q}_x^2 + i \frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta - \frac{1}{1 + \nu_p/\nu_e} \left(\frac{m \mathcal{V}_z \zeta}{\hbar}\right)^2}, \quad (4.66)$$

$$\widehat{Im f_j^{(1)}} = \frac{1}{(\nu_e + \nu_p)} \frac{\left(1 + i \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta\right) \widehat{Im r_j^{(1)}} - j \sqrt{1 + \nu_p/\nu_e} \mathcal{Q}_x \widehat{Re r_j^{(1)}}}{1 + j^2 \mathcal{Q}_x^2 + i \frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta - \frac{1}{1 + \nu_p/\nu_e} \left(\frac{m \mathcal{V}_z \zeta}{\hbar}\right)^2}. \quad (4.67)$$

Sustituyendo en las relaciones de la densidad de corriente (4.29) y (4.30) obtenemos

$$J_{nx}^{(1)} = \frac{e\Delta}{\hbar(\nu_e + \nu_p)L_y} \frac{\sqrt{1 + \nu_p/\nu_e} \mathcal{Q}_x \widehat{Re r_1^{(1)}}(0) - \widehat{Im r_1^{(1)}}(0)}{1 + \mathcal{Q}_x^2}, \quad (4.68)$$

$$J_{nz}^{(1)} = \frac{2ie\hbar}{mlL_y\nu_e} \partial_\zeta \left. \frac{\left(1 + i \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta\right) \widehat{Re r_0^{(1)}}}{1 + \frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta - \frac{1}{1 + \nu_p/\nu_e} \left(\frac{m \mathcal{V}_z \zeta}{\hbar}\right)^2} \right|_{\zeta=0}. \quad (4.69)$$

4.6.1 Cálculo de la densidad de corriente $J_{nx}^{(1)}$

De la relación (4.65) consideramos la función

$$R^{(1)}(k, k_z) = \sin kl f^{(0)}(k, k_z)$$

y escribimos su coeficiente j de Fourier

$$R_j^{(1)}(k_z) = \frac{l}{2\pi} \int_{\pi/l}^{\pi/l} dk e^{-iklj} R^{(1)}(k, k_z).$$

Volviendo a la función $R^{(1)}$ tenemos que

$$R^{(1)}(k, k_z) = \sin kl f^{(0)}(k, k_z) = \frac{1}{2i} \left(e^{ikl} f^{(0)}(k, k_z) - e^{-ikl} f^{(0)}(k, k_z) \right),$$

con lo que sustituyendo lo anterior en el coeficiente $j = 1$ de Fourier $R_1^{(1)}$ obtenemos

$$R_1^{(1)}(k_z) = \frac{1}{2i} \left(f_0^{(0)}(k_z) - f_2^{(0)}(k_z) \right).$$

Consideramos ahora los coeficientes $j = 1$ de Fourier de $r^{(1)}$:

$$r_1^{(1)} = -\frac{\Delta l}{2\hbar} \partial_x \left(\frac{f_0^{(0)} - f_2^{(0)}}{2i} \right) - \frac{\hbar k_z}{m} \partial_z f_1^{(0)} - \partial_t|_0 f_1^{(0)}. \quad (4.70)$$

Aplicamos a la parte real e imaginaria de $r_1^{(1)}$,

$$Re r_1^{(1)} = \frac{\Delta l}{4\hbar} \partial_x Im f_2^{(0)} - \frac{\hbar k_z}{m} \partial_z Re f_1^{(0)} - \partial_t|_0 Re f_1^{(0)}, \quad (4.71)$$

$$Im r_1^{(1)} = \frac{\Delta l}{4\hbar} \partial_x (f_0^{(0)} - Re f_2^{(0)}) - \frac{\hbar k_z}{m} \partial_z Im f_1^{(0)} - \partial_t|_0 Im f_1^{(0)} \quad (4.72)$$

la transformada de Fourier:

$$\widehat{Re r_1^{(1)}} = \frac{\Delta l}{4\hbar} \partial_x \widehat{Im f_2^{(0)}} - \frac{\hbar i}{m} \partial_z \partial_\zeta \widehat{Re f_1^{(0)}} - \partial_t|_0 \widehat{Re f_1^{(0)}}, \quad (4.73)$$

$$\widehat{Im r_1^{(1)}} = \frac{\Delta l}{4\hbar} \partial_x (\widehat{f_0^{(0)}} - \widehat{Re f_2^{(0)}}) - \frac{\hbar i}{m} \partial_z \partial_\zeta \widehat{Im f_1^{(0)}} - \partial_t|_0 \widehat{Im f_1^{(0)}}. \quad (4.74)$$

Utilizando las expresiones (4.58) y (4.59) evaluamos $\zeta = 0$ en la parte imaginaria

$$\begin{aligned} \widehat{Im r_1^{(1)}}(0) &= -\frac{\Delta l}{4\hbar} \partial_x \left(\frac{n}{1 + 4Q_x^2} \frac{lL_y I_2}{2I_0} - \frac{lL_y n}{2} \right) \\ &\quad - \frac{i\hbar}{m} \partial_z \left[\sqrt{\frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p}} Q_x \frac{lL_y I_1}{2I_0} n \frac{i}{(1 + Q_x^2)^2} \left(\frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \frac{mV_z}{\hbar} \right) \right] \\ &\quad + \frac{\hbar L_y}{e\Delta} \partial_t|_0 J_{nx}^{(0)}, \end{aligned} \quad (4.75)$$

donde en el último término se ha utilizado a orden principal la relación $J_{nx} = -(e\Delta)/(\hbar L_y) \widehat{Im f_1}(0)$.

Análogamente para la parte real de la transformada de $r_1^{(0)}$:

$$\begin{aligned}
\widehat{Re r_1^{(1)}}(0) &= -\frac{\Delta l}{4\hbar} \partial_x \left(\frac{2Q_x}{\sqrt{1+\nu_p/\nu_e}} \frac{n}{1+4Q_x^2} \right) \frac{lL_y I_2}{2I_0} \\
&\quad - \frac{i\hbar lL_y I_1}{m 2I_0} \partial_z \left[n \frac{im\mathcal{V}_z}{\hbar(\nu_e + \nu_p)(1+Q_x^2)} \left(\nu_e - \frac{2\nu_e + \nu_p}{1+Q_x^2} \right) \right] \\
&\quad - \frac{lL_y I_1}{2I_0} \partial_t|_0 \left(\frac{n}{1+Q_x^2} \right) \\
&= -\frac{\Delta l^2 L_y I_2}{4\hbar I_0 \sqrt{1+\nu_p/\nu_e}} \partial_x \left(\frac{nQ_x}{1+4Q_x^2} \right) \\
&\quad + \frac{lL_y I_1}{2I_0(\nu_e + \nu_p)} \partial_z \left[\frac{n\mathcal{V}_z}{(1+Q_x^2)^2} (\nu_e Q_x^2 - \nu_e - \nu_p) \right] \\
&\quad - \frac{lL_y I_1}{2I_0} \partial_t|_0 \left(\frac{n}{1+Q_x^2} \right). \tag{4.76}
\end{aligned}$$

Ahora sustituimos en la relación (4.68) de $J_{nx}^{(1)}$ las funciones obtenidas de $\widehat{Re r_1^{(1)}}(0)$ y $\widehat{Im r_1^{(1)}}(0)$:

$$\begin{aligned}
J_{nx}^{(1)} &= \frac{e\Delta}{\hbar(\nu_e + \nu_p)(1+Q_x^2)} \left\{ -\sqrt{1+\frac{\nu_p}{\nu_e}} Q_x \frac{\Delta l^2 I_2}{4\hbar I_0 \sqrt{1+\nu_p/\nu_e}} \partial_x \left(\frac{nQ_x}{1+4Q_x^2} \right) \right. \\
&\quad + \frac{lI_1 Q_x}{2\nu_e I_0 \sqrt{1+\nu_p/\nu_e}} \partial_z \left[\frac{n\mathcal{V}_z}{(1+Q_x^2)^2} (\nu_e Q_x^2 - \nu_e - \nu_p) \right] \\
&\quad - \frac{lI_1}{2I_0} \sqrt{1+\nu_p/\nu_e} Q_x \partial_t|_0 \left(\frac{n}{1+Q_x^2} \right) + \frac{\Delta l^2 I_2}{8\hbar I_0} \partial_x \left[n \left(\frac{1}{1+4Q_x^2} - \frac{I_0}{I_2} \right) \right] \\
&\quad \left. - \frac{lI_1(2\nu_e + \nu_p)\sqrt{\nu_e}}{2I_0(\nu_e + \nu_p)^{3/2}} \partial_z \left(\frac{nQ_x \mathcal{V}_z}{(1+Q_x^2)^2} \right) - \frac{\hbar}{e\Delta} \partial_t|_0 J_{nx}^{(0)} \right\}.
\end{aligned}$$

Agrupamos por operadores ∂_x , ∂_z y $\partial_t|_0$:

$$\begin{aligned}
J_{nx}^{(1)} &= -\frac{e\Delta}{\hbar(\nu_e + \nu_p)(1+Q_x^2)} \left\{ \frac{\Delta l^2 I_2}{8\hbar I_0} \left[2Q_x \partial_x \left(\frac{nQ_x}{1+Q_x^2} \right) - \partial_x \left(\frac{n}{1+4Q_x^2} \right) + \frac{I_0}{I_2} \partial_x n \right] \right. \\
&\quad - \frac{lI_1}{2I_0 \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}} \left[Q_x \partial_z \left(\frac{n\mathcal{V}_z(\nu_e Q_x^2 - \nu_e - \nu_p)}{(1+Q_x^2)^2} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{(2\nu_e + \nu_p)\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \partial_z \left(\frac{nQ_x \mathcal{V}_z}{(1+Q_x^2)^2} \right) \right] \\
&\quad \left. + \frac{lI_1}{2I_0} \sqrt{1+\nu_p/\nu_e} \left[Q_x \partial_t|_0 \left(\frac{n}{1+Q_x^2} \right) + \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \partial_t|_0 \left(\frac{nQ_x}{1+Q_x^2} \right) \right] \right\}. \tag{4.77}
\end{aligned}$$

El último término entre corchetes desarrollado queda

$$\left(1 + \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p}\right) \frac{Q_x}{1 + Q_x^2} \partial_t|_0 n + n \left(-\frac{2Q_x^2}{(1 + Q_x^2)^2} + \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \frac{1 - Q_x^2}{(1 + Q_x^2)^2} \right) \partial_t|_0 Q_x,$$

al cual le aplicaremos a orden principal la ecuación de transporte (4.31) y la componente x de la ecuación vectorial de la ley de Ampère (4.32) para sustituir el operador $\partial_t|_0$.

Finalmente

$$\begin{aligned} J_{nx}^{(1)} = & \frac{e\Delta l}{2\hbar(\nu_e + \nu_p)} \left\{ -\frac{\Delta l}{4\hbar} \left[\partial_x n + \frac{2I_2}{I_0} Q_x \partial_x \frac{nQ_x}{1 + 4Q_x^2} - \frac{I_2}{I_0} \partial_x \frac{n}{1 + 4Q_x^2} \right] \right. \\ & + \frac{I_1}{I_0 \sqrt{1 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}} \left[Q_x \partial_z \left(\frac{nV_z(Q_x^2 - 1 - \frac{\nu_p}{\nu_e})}{(1 + Q_x^2)^2} \right) - \frac{2 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}{1 + \frac{\nu_p}{\nu_e}} \partial_z \left(\frac{nQ_x V_z}{(1 + Q_x^2)^2} \right) \right. \\ & \left. \left. + \frac{2 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}{e} \frac{Q_x}{1 + Q_x^2} \nabla_x \cdot \underline{J}_n^{(0)} - n \frac{el[1 - (3 + 2\frac{\nu_p}{\nu_e})Q_x^2]}{\hbar\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}(1 + Q_x^2)^2} \frac{J_x - J_{nx}^{(0)}}{\varepsilon} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.78)$$

4.6.2 Cálculo de la densidad de corriente $J_{nz}^{(1)}$

Igual como se hizo en la anterior sección, de la relación (4.65) consideramos la función

$$R^{(1)}(k, k_z) = \sin kl f^{(0)}(k, k_z)$$

y escribimos su coeficiente j de Fourier

$$R_j^{(1)}(k_z) = \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk e^{-iklj} R^{(1)}(k, k_z).$$

Volviendo a la función $R^{(1)}$ tenemos que

$$R^{(1)}(k, k_z) = \sin kl f^{(0)}(k, k_z) = \frac{1}{2i} (e^{ikl} f^{(0)}(k, k_z) - e^{-ikl} f^{(0)}(k, k_z)),$$

con lo que sustituyendo lo anterior en el coeficiente $j = 0$ de Fourier $R_0^{(1)}$ y considerando que $f_j^* = f_{-j}^*$ obtenemos

$$R_0^{(1)}(k_z) = -Im f_1^{(0)}(k_z).$$

Consideramos ahora los coeficientes $j = 0$ de Fourier de $r^{(1)}$,

$$r_0^{(1)} = \frac{\Delta l}{2\hbar} \partial_x Im f_1^{(0)} - \frac{\hbar k_z}{m} \partial_z f_0^{(0)} - \partial_t|_0 f_0^{(0)},$$

y calculamos su transformada recordando que $\widehat{Im f_0^{(0)}} = 0$ de (4.59):

$$\widehat{r_0^{(1)}}(\zeta) = \frac{\Delta l}{2\hbar} \partial_x \widehat{Im f_1^{(0)}} - i \frac{\hbar}{m} \partial_z \partial_\zeta \widehat{f_0^{(0)}} - \partial_t|_0 \widehat{f_0^{(0)}} = \widehat{Re r_0^{(1)}}(\zeta), \quad (4.79)$$

$$\widehat{Im r_0^{(1)}}(\zeta) = 0. \quad (4.80)$$

Notar que $\widehat{Re r_0^{(1)}}(0) = 0$, lo cual en (4.79) utilizando (4.29) para el término $\widehat{Im f_1^{(0)}}$, (4.30) para el término $\partial_\zeta \widehat{f_0^{(0)}}$ y (4.13) para el término $\partial_t|_0 \widehat{f_0^{(0)}}$ da

$$e \partial_t|_0 n + \nabla_x \cdot \underline{J}_n^{(0)} = 0.$$

Simplificando (4.69) junto con $\widehat{Re r_0^{(1)}}(0) = 0$ se llega a que:

$$J_{nz}^{(1)} = \frac{2ie\hbar}{m\nu_e L_y} \partial_\zeta \widehat{Re r_0^{(1)}} \Big|_{\zeta=0}$$

y de aquí

$$\begin{aligned} J_{nz}^{(1)} = & i \frac{e\Delta}{m\nu_e L_y} \partial_x \partial_\zeta \widehat{Im f_1^{(0)}}(0) + \frac{2e\hbar^2}{m^2 l \nu_e L_y} \partial_z \partial_\zeta^2 \widehat{f_0^{(0)}}(0) - i \frac{2e\hbar}{m l \nu_e L_y} \partial_t|_0 \partial_\zeta \widehat{f_0^{(0)}}(0) = \\ & i \frac{e\Delta}{m\nu_e L_y} \partial_x \left(\partial_\zeta \widehat{Im f_1^{(0)}}(0) \right) + \frac{2e\hbar^2}{m^2 l L_y \nu_e} \partial_z \left(\partial_\zeta^2 \widehat{f_0^{(0)}}(0) \right) - \frac{1}{\nu_e} \partial_t|_0 J_{nz}^{(0)}. \end{aligned}$$

Del lado derecho de la última igualdad calculamos término a término. Comenzamos por el segundo. De (4.51) obtenemos

$$\partial_\zeta^2 \widehat{Re f_0^{(0)}} = \partial_\zeta^2 \frac{l L_y n}{2} \frac{\left(1 + \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta\right) e^{-\frac{m K_B T}{2\hbar^2} \zeta^2}}{1 + i \frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \zeta - \frac{1}{1 + \nu_p/\nu_e} \left(\frac{m \mathcal{V}_z \zeta}{\hbar}\right)^2}$$

Sea

$$\begin{aligned} a &= i \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar}, \\ b &= \frac{m K_B T}{2\hbar^2}, \\ c &= i \frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar}, \\ d &= \frac{\nu_e}{\nu_e + \nu_p} \left(\frac{m \mathcal{V}_z}{\hbar} \right)^2. \end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned} \frac{(1+a\zeta)e^{-b\zeta^2}}{1+c\zeta-d\zeta^2} &= (1+a\zeta)(1-b\zeta^2+\mathcal{O}(\zeta^3))[1-c\zeta+d\zeta^2+c^2\zeta^2+\mathcal{O}(\zeta^3)] = \\ &[1+a\zeta-b\zeta^2+\mathcal{O}(\zeta^3)][1-c\zeta+(d+c^2)\zeta^2] = 1+(a-c)\zeta+(d+c^2-b-ac)\zeta^2+\mathcal{O}(\zeta^3) \\ \partial_\zeta^2 \frac{(1+a\zeta)e^{-b\zeta^2}}{1+c\zeta-d\zeta^2} \Big|_{\zeta=0} &= 2(d-b+c^2-ac), \end{aligned}$$

con lo que

$$\partial_\zeta^2 \widehat{Re f_0^{(0)}}(0) = -\frac{mlL_y}{\hbar^2} n \left(\frac{K_B T}{2} + m\mathcal{V}_z^2 \right).$$

y

$$\frac{2e\hbar^2}{m^2 l L_y \nu_e} \partial_z \left(\partial_\zeta^2 \widehat{f_0^{(0)}}(0) \right) = -\frac{e}{m\nu_e} \partial_z [n(K_B T + 2m\mathcal{V}_z^2)].$$

Calculamos ahora el primer término de la anterior relación de $J_{nz}^{(1)}$:

$$\partial_\zeta \widehat{Im f_1^{(0)}}(0) = +\frac{lL_y I_1 \mathcal{Q}_x}{2I_0 \sqrt{1+\nu_p/\nu_e}} n \frac{i}{(1+\mathcal{Q}_x^2)^2} \left(\frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \frac{m\mathcal{V}_z}{\hbar} \right)$$

y de aquí

$$i \frac{e\Delta}{m\nu_e L_y} \partial_x [\partial_\zeta \widehat{Im f_1^{(0)}}(0)] = -\frac{e\Delta l I_1 (2\nu_e + \nu_p)}{2\hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)} (\nu_e + \nu_p) I_0} \partial_x \left(\frac{n\mathcal{Q}_x \mathcal{V}_z}{(1+\mathcal{Q}_x^2)^2} \right).$$

Recapitulamos teniendo en cuenta el resultado para la densidad de corriente a orden principal $J_{nz}^{(0)} = en\mathcal{V}_z$:

$$\begin{aligned} J_{nz}^{(1)} = & -\frac{e\Delta l (2\nu_e + \nu_p) I_1}{2\hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)} (\nu_e + \nu_p) I_0} \partial_x \left(\frac{n\mathcal{Q}_x \mathcal{V}_z}{(1+\mathcal{Q}_x^2)^2} \right) \\ & - \frac{e}{m\nu_e} \partial_z [n(K_B T + 2m\mathcal{V}_z^2)] - \frac{e}{\nu_e} \partial_t |_0 (n\mathcal{V}_z). \end{aligned} \quad (4.81)$$

Desarrollamos el último término de la anterior ecuación,

$$\begin{aligned} \partial_t |_0 (n\mathcal{V}_z) &= (\partial_t |_0 n) \mathcal{V}_z + n \partial_t |_0 \mathcal{V}_z = -\frac{\mathcal{V}_z}{e} \nabla_x \cdot \underline{J}_n^{(0)} + n \frac{e}{m\nu_e} \frac{J_z - J_{nz}^{(0)}}{\varepsilon} \\ &= -\mathcal{V}_z \frac{\Delta l I_1}{2\hbar I_0 \sqrt{1+\nu_p/\nu_e}} \partial_x \left(\frac{n\mathcal{Q}_x}{1+\mathcal{Q}_x^2} \right) - \mathcal{V}_z \partial_z (n\mathcal{V}_z) + \frac{en}{m\nu_e} \frac{J_z - J_{nz}^{(0)}}{\varepsilon}, \end{aligned}$$

donde en la segunda igualdad se ha utilizado a orden principal la ecuación de transporte (4.31) y además

$$\partial_t|_0 \mathcal{V}_z = e \frac{J_z - J_{nz}^{(0)}}{\varepsilon m \nu_e}$$

proviniente de la componente z de la ley de Ampère (4.32):

$$J_z = \varepsilon \partial_t|_0 F_z + J_{nz}^{(0)} = \varepsilon \partial_t|_0 \left(\mathcal{V}_z \frac{m \nu_e}{e} - \frac{B}{m} \hbar k_y \cos \theta \right) + J_{nz}^{(0)} = \varepsilon \frac{m \nu_e}{e} \partial_t|_0 \mathcal{V}_z + J_{nz}^{(0)}.$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} J_{nz}^{(1)} &= \frac{e \Delta l}{2 \hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}} \frac{I_1}{I_0} \left[\mathcal{V}_z \partial_x \left(\frac{n \mathcal{Q}_x}{1 + \mathcal{Q}_x^2} \right) - \frac{2 \nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \partial_x \left(\frac{n \mathcal{Q}_x \mathcal{V}_z}{(1 + \mathcal{Q}_x^2)^2} \right) \right] \\ &+ \frac{e}{\nu_e} [n \mathcal{V}_z \partial_z (n \mathcal{V}_z) - 2 \partial_z (n \mathcal{V}_z^2)] - \frac{e K_B T}{m \nu_e} \partial_z n - \frac{e^2 n}{m \nu_e^2} \frac{J_z - J_{nz}^{(0)}}{\varepsilon} \end{aligned} \quad (4.82)$$

y finalmente

$$\begin{aligned} J_{nz}^{(1)} &= \frac{e \Delta l}{2 \hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}} \frac{I_1}{I_0} \left[\mathcal{V}_z \partial_x \left(\frac{n \mathcal{Q}_x}{1 + \mathcal{Q}_x^2} \right) - \frac{2 \nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \partial_x \left(\frac{n \mathcal{Q}_x \mathcal{V}_z}{(1 + \mathcal{Q}_x^2)^2} \right) \right] \\ &- \frac{e}{\nu_e} [n \mathcal{V}_z \partial_z \mathcal{V}_z + \partial_z (n \mathcal{V}_z^2)] - \frac{e K_B T}{m \nu_e} \partial_z n - \frac{e^2 n}{m \nu_e^2} \frac{J_z - J_{nz}^{(0)}}{\varepsilon}, \end{aligned} \quad (4.83)$$

donde los términos \mathcal{Q}_x , \mathcal{V}_z y k_y se definieron como

$$\mathcal{Q}_x = \frac{e l \left(F - \frac{B}{m} \hbar k_y \sin \theta \right)}{\hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}} = \frac{e l \partial_x \Omega}{\hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}}, \quad (4.84)$$

$$\mathcal{V}_z = \frac{e}{m \nu_e} \left(F_z + \frac{B}{m} \hbar k_y \cos \theta \right) = \frac{e}{m \nu_e} \partial_z \Omega, \quad (4.85)$$

$$k_y = \frac{e B}{\hbar} (x \sin \theta - z \cos \theta). \quad (4.86)$$

4.7 Dominio y ecuaciones diferenciales con dimensiones

En la figura (4.1) se muestra un esquema del dominio del problema, donde θ es el ángulo entre el vector del campo magnético y la dirección de crecimiento

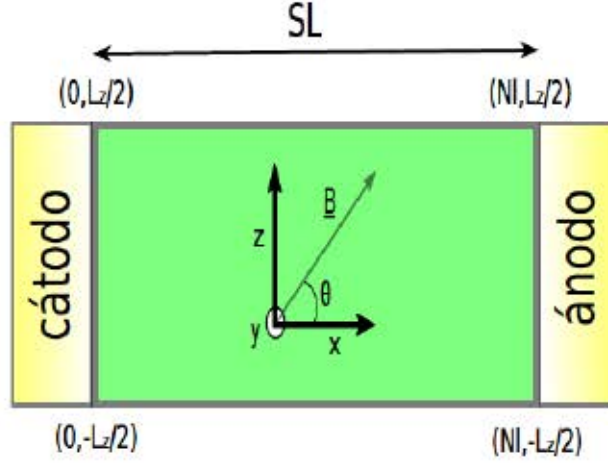


Figura 4.1: Dominio con dimensiones del modelo.

de los pozos de la superred donde las dimensiones del dominio son $(x, z) \in [0, NL] \times \left[-\frac{L_z}{2}, \frac{L_z}{2}\right]$.

Hacemos ahora una recopilación de las ecuaciones del problema. La ecuación de los momentos para la densidad n , la ley de Ampère y la ecuación de la divergencia nula son respectivamente:

$$e\partial_t n + \nabla_{\underline{x}} \cdot \underline{J}_n = 0, \quad (4.87)$$

$$\varepsilon\partial_t \underline{F} + \underline{J}_n = \underline{J}, \quad (4.88)$$

$$\nabla_{\underline{x}} \cdot \underline{J} = 0. \quad (4.89)$$

$$(4.90)$$

La variable W designaba el potencial eléctrico antes de definir el cambio de variable $\Omega = W - \hbar^2 k_y^2 / (2em)$, con lo que teníamos que $F = \partial_x W$ y $F_z = \partial_z W$.

La ecuación de transporte (4.87) tendrá las condiciones de contorno definidas sobre los flujos $\underline{J}_n = \underline{J}_n^{(0)} + \underline{J}_n^{(1)}$. Utilizaremos la condición de frontera óhmica en los contactos, ya que de otros trabajos se sabe que son apropiadas para describir auto-oscilaciones de la corriente [34]:

$$J_{nx}(x = 0, L, z, t) = \sigma F, \quad (4.91)$$

donde el parámetro σ es la conductividad eléctrica. En los lados aislados de la superred imponemos flujo nulo en la dirección del eje z :

$$J_{nz}(x, z = \pm L_z/2, t) = 0. \quad (4.92)$$

La ecuación de Poisson para el antiguo potencial eléctrico W es

$$\varepsilon (\partial_x^2 + \partial_z^2) W = e(n - N_D), \quad (4.93)$$

y sus condiciones de contorno usuales para el potencial cuando se aplica un voltaje V quedan

$$W(0, z, t) = 0, \quad W(L, z, t) = V, \quad (4.94)$$

$$\partial_z W(x, \pm L_z/2, t) = 0. \quad (4.95)$$

Una vez aplicado el cambio de variable $\Omega = W - \hbar^2 k_y^2 / (2em)$, la ecuación para Ω queda:

$$\varepsilon (\partial_x^2 + \partial_z^2) \Omega = e \left(n - N_D - \frac{\varepsilon B^2}{m} \right). \quad (4.96)$$

A raíz del cambio, las condiciones de contorno para la ecuación de transporte son:

$$J_{nx}(x=0, z, t) = \sigma \left[\partial_x \Omega - \frac{eB^2}{m} z \sin \theta \cos \theta \right], \quad (4.97)$$

$$J_{nx}(x=L, z, t) = \sigma \left[\partial_x \Omega + \frac{eB^2}{m} (L \sin \theta - z \cos \theta) \sin \theta \right], \quad (4.98)$$

$$J_{nz}(x, z = \pm L_z/2, t) = 0. \quad (4.99)$$

Las condiciones de contorno para el potencial eléctrico Ω quedan:

$$\Omega(x=0, z, t) = -\frac{eB^2}{2m} (\cos \theta)^2 z^2, \quad (4.100)$$

$$\Omega(x=L, z, t) = V - \frac{eB^2}{2m} [L \sin \theta - z \cos \theta]^2, \quad (4.101)$$

$$\partial_z \Omega(x, z = \pm L_z/2, t) = \frac{eB^2}{m} \left(x \sin \theta \mp \frac{L_z}{2} \cos \theta \right) \cos \theta. \quad (4.102)$$

4.7.1 Adimensionalización del modelo

A partir de ahora utilizaremos la versión adimensionalizada de las ecuaciones tomando las escalas de la tabla (4.2), con lo que las dimensiones del dominio pasan a ser $(x, z) \in [0, N] \times \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$. En el apéndice (A) se muestra cómo se han adimensionalizado las ecuaciones.

n	Ω	v_x	v_z	x, k^{-1}
$N_D + \frac{\varepsilon B^2}{m}$	$\frac{\hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}}{e}$	$\frac{\Delta U_1}{4\hbar I_0 \sqrt{1 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}}$	$\frac{\hbar \sqrt{1 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}}{m L_z}$	l
$38.5422 \times \frac{10^{22}}{\text{m}^3}$	$l \times 4.4994 \frac{\text{kV}}{\text{cm}}$	$6.90258 \frac{\text{km}}{\text{s}}$	$0.73523 \frac{\text{km}}{\text{s}}$	8.3 nm

z, k_z^{-1}	t
L_z	$\frac{[x]}{[v_x]}$
$20 \mu\text{m}$	1.189 ps

Tabla 4.2: Escala para las ecuaciones del modelo. Los valores numéricos están tomados del artículo Nature [20].

Las ecuaciones de los momentos junto con la ecuación de Poisson resultan

$$\partial_t n + \partial_x J_{nx} + \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} \partial_z J_{nz} = 0, \quad (4.103)$$

$$\varphi \partial_t \partial_x \Omega + J_{nx} = J_x, \quad (4.104)$$

$$\varphi \frac{l}{L_z} \frac{[v_x]}{[v_z]} \partial_t \partial_z \Omega + J_{nz} = J_z, \quad (4.105)$$

$$\partial_{xx} \Omega + \frac{l^2}{L_z^2} \partial_{zz} \Omega = \frac{n-1}{\varphi}, \quad (4.106)$$

donde $\varphi = \frac{\varepsilon \hbar \nu_e \tau_e}{e^2 l^2 [n]} \approx 0.0972$ y donde las variables encerradas entre corchetes simbolizan sus respectivas escalas dimensionales.

Las condiciones de contorno para la ecuación de transporte quedan

$$J_{nx}(0, z, t) = \sigma (\partial_x \Omega(0, z, t) - \beta z \sin \theta \cos \theta), \quad (4.107)$$

$$J_{nx}(N, z, t) = \sigma \left[\partial_x \Omega(N, z, t) - \beta \left(z \cos \theta - \frac{Nl}{L_z} \sin \theta \right) \sin \theta \right] \quad (4.108)$$

$$J_{nz}(x, \pm \frac{1}{2}, t) = 0, \quad (4.109)$$

con $\beta = \frac{e^2 B^2 l L_z}{m \hbar \nu_e \tau_e} \approx 2.287 \times 10^4$ y la unidad de conductividad

$$[\sigma] = \frac{e^2 l^2 \Delta [n] I_1}{4 \hbar^2 (\nu_e + \nu_p) I_0} \approx 947.3412787 (\text{Ohm} \times \text{m})^{-1}.$$

Las versiones adimensionalizadas de las condiciones inyectora y colectora de la ecuación de Poisson(4.100) y (4.101) quedan

$$\Omega(0, z, t) = -\beta \frac{L_z}{2l} \cos^2 \theta z^2, \quad (4.110)$$

$$\Omega(N, z, t) = \frac{e}{\hbar \nu_e \tau_e} V - \beta \frac{L_z}{2l} \left(\frac{Nl}{L_z} \sin \theta - z \cos \theta \right)^2, \quad (4.111)$$

respectivamente, y para los bordes aislados resultan

$$\partial_z \Omega(x, z = \pm 1/2, t) = \beta \left(x \sin \theta \mp \frac{L_z}{2l} \cos \theta \right) \cos \theta \quad (4.112)$$

al que tomábamos condiciones Neumann homogéneas en el potencial eléctrico W original.

De los cálculos a orden principal de la expansión de la función de distribución obtenemos las siguientes relaciones adimensionalizadas de la densidad de corriente:

$$J_{nx}^{(0)} = -\frac{\Delta}{[n][v_x]\hbar L_y} \widehat{\text{Im} f_1^{(0)}}(0) = 2n \frac{\partial_x \Omega}{1 + (\partial_x \Omega)^2}, \quad (4.113)$$

$$J_{nz}^{(0)} = \frac{2i\hbar}{[n][v_z]mL_y} \partial_\zeta \widehat{f_0^{(0)}}(0) = n \partial_z \Omega \quad (4.114)$$

y a primer orden

$$\begin{aligned} J_{nx}^{(1)} = & -\delta_1 \left(1 - \frac{I_2}{I_0} \frac{1 - 2Q_x^2}{1 + 4Q_x^2} - \frac{2I_1^2(1 + \tau_e^{-2})}{I_0^2} \frac{Q_x^2}{(1 + Q_x^2)^2} \right) \frac{\partial_x n}{1 + Q_x^2} \\ & -\delta_2 \frac{1 - (1 + 2\tau_e^2)Q_x^2}{(1 + Q_x^2)^3} n \left(J_x - \frac{2nQ_x}{1 + Q_x^2} \right) \\ & -\delta_3 \left(\frac{I_2}{I_1} \frac{5 - 4Q_x^2}{(1 + 4Q_x^2)^2} - \frac{(1 + \tau_e^{-2})I_1}{I_0} \frac{1 - Q_x^2}{(1 + Q_x^2)^3} \right) \frac{nQ_x \partial_x Q_x}{1 + Q_x^2} \\ & + \frac{\delta_4}{1 + Q_x^2} \left\{ (-\tau_e^{-2} + (2 + \tau_e^2)Q_x^2) \frac{2Q_x \mathcal{V}_z \partial_z n}{(1 + Q_x^2)^2} \right. \\ & + \frac{2n}{\tau_e^2(1 + Q_x^2)^3} [(-1 - \tau_e^2 + (3 + 5\tau_e^2 + 4\tau_e^4 - 2\tau_e^2 Q_x^2)Q_x^2) \mathcal{V}_z \partial_z Q_x \\ & \left. + (1 + Q_x^2)(-1 + \tau^2(2 + \tau_e^2)Q_x^2) Q_x \partial_z \mathcal{V}_z \right\}, \quad (4.115) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_{nz}^{(1)} = & \frac{\delta_1 I_1^2}{I_0^2} \left[\mathcal{V}_z \partial_x \left(\frac{nQ_x}{1 + Q_x^2} \right) - (1 + \tau_e^{-2}) \partial_x \left(\frac{n\mathcal{V}_z Q_x}{(1 + Q_x^2)^2} \right) \right] \\ & -\eta_1 [n\mathcal{V}_z \partial_z \mathcal{V}_z + \partial_z (n\mathcal{V}_z^2)] - \eta_2 \partial_z n - \eta_3 (J_z - n\mathcal{V}_z)n, \quad (4.116) \end{aligned}$$

donde

$$J_{nx} = J_{nx}^{(0)} + J_{nx}^{(1)}, \quad J_{nz} = J_{nz}^{(0)} + J_{nz}^{(1)}$$

y

$$\delta_1 = \frac{\Delta I_0}{2\hbar\nu_e\tau_e I_1} \approx 2.495, \quad \delta_2 = \frac{e^2[n]\Delta l^2 I_1}{2\hbar^2\nu_e^2\tau_e^4\varepsilon I_0} \approx 0.355, \quad \delta_3 = \frac{\Delta}{\hbar\nu_e\tau_e} \approx 5.088,$$

$$\delta_4 = \frac{\hbar}{m\nu_e\tau_e L_z^2} \approx 7.6 \times 10^{-7}, \quad \eta_1 = \frac{\hbar\tau_e}{m\nu_e L_z^2} \approx 5.514243 \times 10^{-5},$$

$$\eta_2 = \frac{k_B T}{\hbar\nu_e\tau_e} \approx 0.096912, \quad \eta_3 = \frac{e^2[n]}{m\nu_e^2\varepsilon} \approx 3295.47045.$$

Capítulo 5

Método de Volúmenes Finitos para la descripción del transporte electrónico

Los Métodos de Volúmenes Finitos (FVM en sus siglas en inglés) aportan una serie de ventajas en la integración numérica de las ecuaciones de tipo convectivo o convectivo-difusivo donde el flujo del fluido toma un papel importante. Por ejemplo, una de estas ventajas es que no es necesario desarrollar los operadores diferenciales correspondientes a la divergencia del flujo. Los métodos FVM son además fácilmente adaptables a mallas no uniformes y son sencillos de implementar en problemas de varias dimensiones.

El problema a resolver numéricamente en su versión bidimensional constará de un sistema de dos ecuaciones acopladas, la ecuación de transporte y la ecuación de Poisson. Los flujos o densidades de corriente en la ecuación de transporte dependerán de la densidad electrónica y del campo eléctrico. Para la correcta implementación del FVM se ha optado primero por resolver una versión unidimensional más sencilla del problema. Por lo tanto este capítulo se divide en dos partes: en una se desarrolla e implementa un método FVM para una versión unidimensional del problema y en la otra se extiende la implementación al problema bidimensional.

El problema unidimensional a integrar constará de dos versiones: cuando se considere la función de distribución a orden principal, que llamaremos problema *convectivo*, y cuando se considere la función de distribución a primer orden, que llamaremos problema *convectivo-difusivo*. Para cada una de las versiones se desarrollará una estrategia diferente basada en FVM.

Para el problema bidimensional, que solo constará de la versión convectiva, se desarrollará un método implícito basado en un esquema FVM con

mallas no uniforme y paso temporal adaptativo.

5.1 Configuración unidimensional

Consideremos ahora que el campo magnético \underline{B} es perpendicular a la dirección de crecimiento de la superred. De la versión adimensionalizada de las condiciones de contorno (4.97)-(4.112) obtenemos las nuevas relaciones (5.1)-(5.4) donde no hay ahora influencia de la variable z :

$$\Omega(0, t) = 0, \quad (5.1)$$

$$\Omega(N, t) = \frac{e}{\hbar \nu_e \tau_e} V - \frac{e^2 B^2 l^2 N^2}{2m \hbar \nu_e \tau_e}, \quad (5.2)$$

$$J_{nx} = \sigma \partial_x \Omega \quad \text{en } x = 0, \quad (5.3)$$

$$J_{nx} = \sigma \left(\partial_x \Omega + \frac{e^2 l^2 B^2 N}{m \hbar \nu_e \tau_e} \right) \quad \text{en } x = N \quad (5.4)$$

Reescribimos las ecuaciones de los momentos considerando la configuración unidimensional del problema. Notar que en la ley de Ampère la densidad de corriente total solo depende de la variable temporal t .

$$\partial_t n + \partial_x J_{nx} = 0 \quad (5.5)$$

$$\partial_{xx} \Omega = \frac{n-1}{\varphi} \quad (5.6)$$

$$\varphi \partial_t \partial_x \Omega + J_{nx} = J_x \quad (5.7)$$

Las ecuaciones adimensionalizadas que integraremos numéricamente en los siguientes apartados para el problema unidimensional a orden principal son la ecuación para la densidad n junto con la ecuación de Poisson (5.6), las condiciones de contorno (5.1-5.4) y la condición inicial $n(x, 0) = 1$. Además, la ecuación de Ampère (5.7) se utilizará para la versión a primer orden del problema.

Una estrategia para integrar numéricamente las ecuaciones es implementar directamente un método de diferencias finitas desarrollando el operador diferencial en el lado derecho de la ecuación diferencial

$$\partial_t n = -\partial_x \left(\frac{2\partial_x \Omega}{1 + \partial_x \Omega^2} n \right). \quad (5.8)$$

Para la condición inyectora se puede tomar $x = 0$ en la relación (4.113) y de la condición (5.3) podemos despejar $n(x = 0, t)$ y obtener la condición inyectora

$$n(x = 0, t) = \frac{\sigma}{2} \left(1 + (\partial_x \Omega(x = 0, t))^2 \right). \quad (5.9)$$

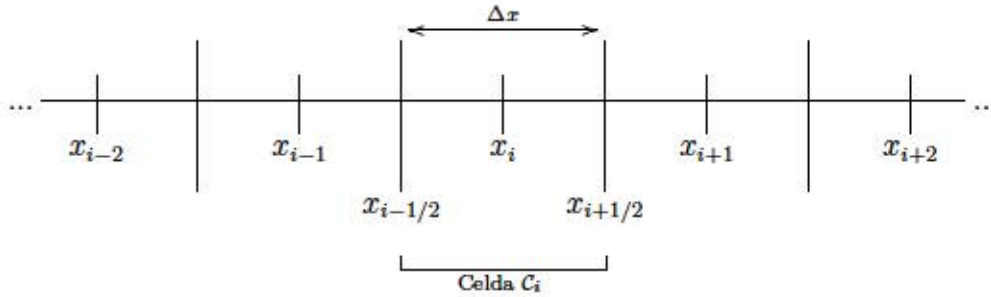
Una estrategia parecida para un problema convectivo-difusivo bidimensional se puede ver en [43].

Desafortunadamente, el método de las diferencias finitas no da resultados satisfactorios ni en el problema a orden principal, ni añadiendo un término difusivo artificial: el método no logra capturar la discontinuidad que se produce en la región de la cola del pulso del campo eléctrico (dicha discontinuidad se podrá ver más adelante en figura 5.1 (a)).

5.1.1 FVM 1D para el modelo a orden principal

En este apartado se detalla cómo se aplica un método de volúmenes finitos ([44, 45, 46, 47, 48, 49]) sobre el problema convectivo, el cual es de carácter puramente hiperbólico. Para la implementación en problemas convectivo-difusivos, consultar los apartados (5.1.2) y (5.1.3).

Comenzamos dividiendo el dominio de integración en celdas C_i llamadas volúmenes de control. Cada celda o volumen de control tendrá una longitud Δx que, aunque pueda ser variable, en el presente texto será constante mientras no se diga lo contrario. Cada x_i pertenece a la celda C_i de interfases $x_{i-1/2}$ y $x_{i+1/2}$, con $1 \leq i \leq N_x$, tal como se ve en el siguiente diagrama:



La ecuación de continuidad

$$\partial_t n + \partial_x J_{nx} = 0 \quad (5.10)$$

escrita a orden principal es

$$\partial_t n + \partial_x \left(\frac{2 \partial_x \Omega}{1 + (\partial_x \Omega)^2} n \right) = 0, \quad (5.11)$$

donde el flujo J_{nx} está definido por el producto entre la velocidad \mathcal{V} y la densidad de electrones n :

$$J_{nx}(x, t; \partial_x \Omega, n) = \mathcal{V}(\partial_x \Omega(x, t; n)) n(x, t; \partial_x \Omega) = \frac{2 \partial_x \Omega}{1 + (\partial_x \Omega)^2} n.$$

Para los siguientes cálculos escribimos $J_{nx} = J_{nx}(n)$ por simplicidad. Integrando espacialmente la ecuación (5.11) sobre el intervalo x_1, x_2 obtenemos la siguiente ley conservativa:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} dx n(x, t) = J_{nx}(n(x_1, t)) - J_{nx}(n(x_2, t)), \quad (5.12)$$

donde en la práctica los límites de integración x_1 y x_2 serán las interfases $x_{i-1/2}$ y $x_{i+1/2}$, respectivamente.

Por otra parte, definimos por \hat{n}_i a la aproximación del valor promedio de $n(x, t)$ en la celda \mathcal{C}_i , esto es

$$\hat{n}_i(t) = \frac{1}{\Delta x} \int_{\mathcal{C}_i} dx n(x, t) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} dx n(x, t). \quad (5.13)$$

Aplicamos el cambio de variable $\xi = x - x_i$ en (5.13), con lo que los límites de integración pasan a ser $\xi = \pm \Delta x/2$. Como el cambio de variable solo depende de la constante x_i , entonces $\left(\frac{\partial^k n}{\partial x^k}\right)_i = \left(\frac{\partial^k n}{\partial \xi^k}\right)_0$. Ahora podemos expandir $n(x, t)$, con t fijo, en una serie de Taylor en x_i obteniendo [45]

$$\begin{aligned} \hat{n}_i &= \frac{1}{\Delta x} \int_{\xi=-\Delta x/2}^{\xi=\Delta x/2} \left[n_i + \xi \left(\frac{\partial n}{\partial x}\right)_i + \frac{\xi^2}{2} \left(\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}\right)_i + \frac{\xi^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 n}{\partial x^3}\right)_i + \dots \right] d\xi \\ &= n_i + \frac{\Delta x^2}{24} \left(\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}\right)_i + \frac{\Delta x^4}{1920} \left(\frac{\partial^4 n}{\partial x^4}\right)_i + O(\Delta x^6) = n_i + O(\Delta x^2), \end{aligned}$$

con lo que el valor promedio de la celda \hat{n}_i y el valor en el centro de la celda n_i difieren por un término de segundo orden. Por claridad escribiremos \hat{n}_i como n_i a partir de ahora.

Si suponemos que $n(x, t)$ es una función *suave* podemos aplicar el operador $\frac{1}{\Delta x} \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt$ a la ecuación (5.12), donde $t_k = k \Delta t$, obteniendo la expresión

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x} \int_{\mathcal{C}_i} dx n(x, t_{k+1}) &= \frac{1}{\Delta x} \int_{\mathcal{C}_i} dx n(x, t_k) \\ &\quad - \frac{1}{\Delta x} \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt [J_{nx}(n(x_{i+1/2}, t)) - J_{nx}(n(x_{i-1/2}, t))] , \end{aligned} \quad (5.14)$$

lo cual sugiere considerar un método numérico de la forma

$$n_i^{k+1} = n_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[J_{nx}^k \Big|_{x_{i+1/2}} - J_{nx}^k \Big|_{x_{i-1/2}} \right], \quad (5.15)$$

donde se ha tomado n_i como la aproximación del valor promedio de $n(x, t)$ de (5.13) y donde J_{nx}^k son las aproximaciones de los valores promediados del flujo J_{nx} a través del tiempo $t_k < t < t_{k+1}$ en la celda de interfases $x_{i\pm 1/2}$, i.e.,

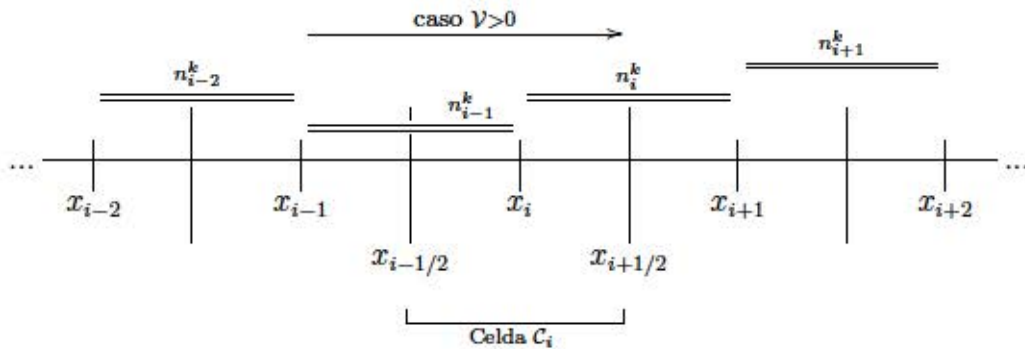
$$J_{nx}^k \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt J_{nx}(n(x_{i\pm 1/2}, t)). \quad (5.16)$$

5.1.1.1 Implementación del término convectivo

En este subapartado desarrollaremos una fórmula explícita para la integración numérica de la ecuación de transporte basado en el FVM. En un subapartado posterior se calculará la versión implícita.

Consideremos $\partial_x J_{nx} = \partial_x \left(\frac{2\partial_x \Omega}{1 + (\partial_x \Omega)^2} n \right)$. Por simplicidad trataremos distintamente la variable de densidad n y la de velocidad \mathcal{V} en la variable de la densidad de corriente J_{nx} :

- una manera de encontrar funciones sencillas del flujo numérico en las interfases localizadas en $x_{i-1/2}$ y en $x_{i+1/2}$ es suponer que el flujo depende, en cuanto a la densidad electrónica n , directamente de los valores promediados n_{i-1} y n_i respectivamente si $\mathcal{V} > 0$, o de n_i y n_{i+1} respectivamente si $\mathcal{V} < 0$. Aunque los valores de n podrían resultar discontinuos en los puntos de la malla x_i , serán continuos en las interfases $x_{i-1/2}$ y $x_{i+1/2}$, como sugiere el siguiente diagrama, con lo que no dará lugar a ninguna ambigüedad en el cálculo numérico del flujo.



- también debemos encontrar un valor que aproxime la derivada parcial del potencial, $\partial_x \Omega$, en las interfases para hallar un perfil de la velocidad $\mathcal{V} = \frac{2\partial_x \Omega}{1 + (\partial_x \Omega)^2}$. Igual que ocurre con el perfil de la densidad

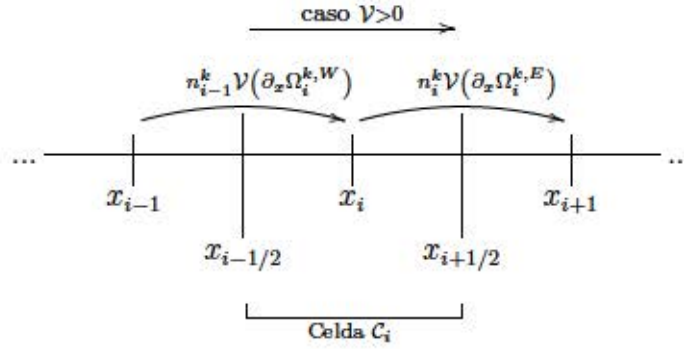
electrónica n como argumento del flujo, se debe utilizar un perfil para $\partial_x \Omega$ continuo en las interfaces. La opción más sencilla es escoger, independientemente del signo de \mathcal{V} , diferencias regresivas para la interfase $x_{i-1/2}$ y diferencias progresivas para la interfase $x_{i+1/2}$, que las denotaremos como $\partial_x \Omega_i^{k,W}$ y $\partial_x \Omega_i^{k,E}$ respectivamente:

$$\partial_x \Omega_i^{k,W} := \frac{\Omega_i^k - \Omega_{i-1}^k}{\Delta x} \quad (5.17)$$

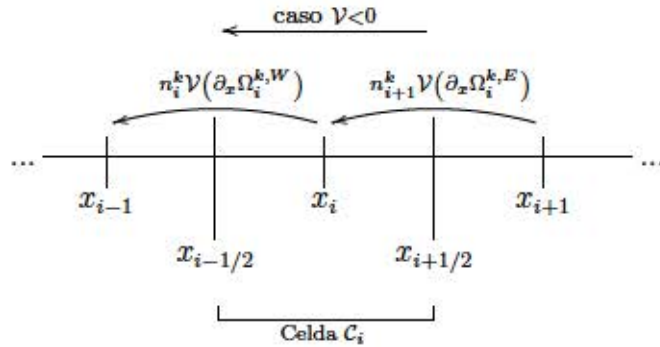
$$\partial_x \Omega_i^{k,E} := \frac{\Omega_{i+1}^k - \Omega_i^k}{\Delta x} \quad (5.18)$$

De manera resumida,

- si $\mathcal{V} > 0$ entonces $J_{nx}^k = n_{i-1}^k \mathcal{V}(\partial_x \Omega_i^{k,W})$ y $J_{nx}^k = n_i^k \mathcal{V}(\partial_x \Omega_i^{k,E})$,
 $x_{i-1/2}$ $x_{i+1/2}$



- si $\mathcal{V} < 0$ entonces $J_{nx}^k = n_i^k \mathcal{V}(\partial_x \Omega_i^{k,W})$ y $J_{nx}^k = n_{i+1}^k \mathcal{V}(\partial_x \Omega_i^{k,E})$.
 $x_{i-1/2}$ $x_{i+1/2}$



Como se verá en los experimentos numéricos para un campo magnético perpendicular al eje x (apartado 5.1.3, figura 5.8), al considerar un rango determinado de valores para el voltaje V se obtendrán oscilaciones autosostenidas

de la densidad de corriente total J_x , implicando que $\mathcal{V} \geq 0$ para todo x, t , con lo que se simplifica notablemente la descripción de los flujos. La consideración del signo de la velocidad será útil en el problema bidimensional (en sección 5.2).

Con todo esto ya somos capaces de escribir un método numérico en la forma (5.15) para la ley conservativa (5.14) con $\mathcal{V} \geq 0$:

$$n_i^{k+1} = n_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[n_i^k \frac{2 \partial_x \Omega_i^{k,E}}{1 + \left(\partial_x \Omega_i^{k,E} \right)^2} - n_{i-1}^k \frac{2 \partial_x \Omega_i^{k,W}}{1 + \left(\partial_x \Omega_i^{k,W} \right)^2} \right]. \quad (5.19)$$

Por claridad denotamos las velocidades interfase respecto de la celda \mathcal{C}_i como $\mathcal{V}_i^{k,W} = \mathcal{V} \left(\partial_x \Omega_i^{k,W} \right)$ y $\mathcal{V}_i^{k,E} = \mathcal{V} \left(\partial_x \Omega_i^{k,E} \right)$, con lo que la anterior ecuación se reescribe

$$n_i^{k+1} = n_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathcal{V}_i^{k,E} n_i^k - \mathcal{V}_i^{k,W} n_{i-1}^k \right). \quad (5.20)$$

Junto con la ecuación de Poisson (5.6) y las condiciones inicial y de contorno (5.1)-(5.4) nos da una aproximación para $n(x, t)$ a primer orden tanto espacial como temporal. Por razones obvias a este método lo llamaremos *up-wind differencing* (UD) explícito el cual es, además, un esquema TVD (*total variation diminishing*) [44].

5.1.1.2 Condiciones de contorno para el modelo convectivo

Una de las ventajas de los FVM es su versatilidad para adaptarse a condiciones impuestas sobre los flujos. Vimos que la ecuación de continuidad (5.10) tiene como condición de contorno en el borde inyector el siguiente requisito sobre el flujo

$$J_{nx}(x = 0, t) = \sigma (\partial_x \Omega - \beta \sin \theta \cos \theta z),$$

que, debido al carácter unidimensional, es simplemente $J_{nx}(x = 0, t) = \sigma \partial_x \Omega$, con lo que numéricamente $J_{nx}^k = \sigma \partial_x \Omega_1^k$, donde $\partial_x \Omega_1^k$ es una aproximación descentrada a la derivada $\partial_x \Omega(x, k \Delta t)$ en $x = 0$. Su implementación en el método numérico se reduce sencillamente a considerar que el volumen de control \mathcal{C}_1 correspondiente a $x = 0 = x_1$ sea de tamaño $\frac{\Delta x}{2}$, con lo que la ley de conservación (5.14) que involucra dicha celda quedaría

$$\begin{aligned} \frac{2}{\Delta x} \int_{\mathcal{C}_1} dx n(x, t_{k+1}) &= \frac{2}{\Delta x} \int_{\mathcal{C}_1} dx n(x, t_k) \\ &- \frac{2}{\Delta x} \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt [J_{nx}(n(x_{3/2}, t)) - J_{nx}(n(x_1, t))] \end{aligned}$$

obteniendo la siguiente condición numérica para n_1^{k+1} :

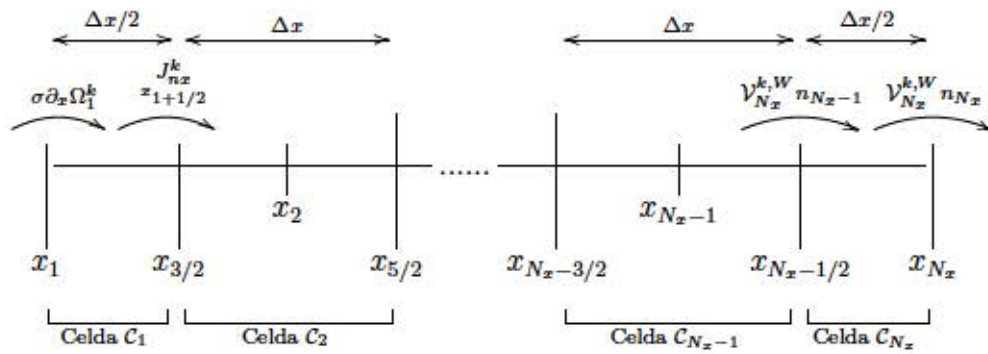
$$n_1^{k+1} = n_1^k - \frac{2\Delta t}{\Delta x} \left[n_1^k \frac{2\partial_x \Omega_1^{k,E}}{1 + (\partial_x \Omega_1^{k,E})^2} - \sigma \partial_x \Omega_1^k \right]$$

Una condición de contorno adecuada para que se produzca el *reciclaje* de la densidad n y del campo $\partial_x \Omega$, es considerar en el colector que $\partial_x \Omega_{N_x}^k = \partial_x \Omega_{N_x-1}^k$ [37], donde conviene recordar que en el presente texto se utiliza la notación $\partial_x \Omega$ como la derivada de Ω respecto de x y $\partial_x \Omega_i^k$ como una diferencia finita a la derivada respecto de x de Ω en $x = x_{ini} + (i-1)\Delta x$, con $t = t_{ini} + (k-1)\Delta t$. Si escogemos diferencias regresivas se llega a que $\partial_x \Omega_{N_x}^{k,E} = \partial_x \Omega_{N_x}^{k,W}$, con lo que las velocidades en la última celda cumplen que

$$\mathcal{V}_{N_x}^{k,E} \leftrightarrow \mathcal{V}_{N_x}^{k,W}. \quad (5.21)$$

Otra interpretación directa es que la derivada espacial del campo en la cara *este* de la última celda (que coincide en $x = N$) sea cero, i.e., $\partial_{xx} \Omega_{N_x}^k = 0$, con lo que por la ecuación de Poisson obtenemos $n_{N_x}^k = 1$ (que traducido en la formulación de volúmenes finitos es que el flujo que entra en la cara *oeste* es igual al que sale por la cara *este* en la última celda para cualquier tiempo). Ambas interpretaciones dan reciclajes idénticos de los perfiles campo y densidad. A pesar de que la última interpretación fija el valor de n_{N_x} , en los experimentos numéricos resulta indistinguible el perfil de la densidad de corriente total J_x respecto al otro caso en el cual $\mathcal{V}_{N_x}^{k,E} = \mathcal{V}_{N_x}^{k,W}$. Por último, consideraremos la última celda C_{N_x} que sea de tamaño $\frac{\Delta x}{2}$.

Las dos condiciones numéricas de los contactos se ven representadas en el siguiente diagrama:



5.1.1.3 FVM como método conservativo

Si consideramos todas las ecuaciones respecto de cada celda \mathcal{C}_i en la forma conservativa discretizada (5.15) y calculamos su suma (teniendo en cuenta las consideraciones anteriores sobre las condiciones de contorno que involucran las celdas \mathcal{C}_1 y \mathcal{C}_{N_x}), entonces los flujos de las celdas vecinas se cancelan obteniendo

$$\sum_{i=1}^{i=N_x} n_i^{k+1} = \sum_{i=1}^{i=N_x} n_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[-2J_{\frac{1}{1}}^k + J_{\frac{1+1/2}{1}}^k + J_{\frac{N_x-1/2}{N_x}}^k \right], \quad (5.22)$$

(donde ya establecimos que $J_{\frac{1}{1}}^k = \sigma \partial_x \Omega_1^k$ y por ejemplo se ha tomado para el colector que $n_{N_x}^k = 1$) con lo que los cambios netos numéricos respecto a la carga total $\frac{1}{N} \int_{x_1}^{x_{N_x}} dx n(x, t)$ son únicamente debidos en función de los flujos de las celdas \mathcal{C}_1 y \mathcal{C}_{N_x} (i.e., los flujos numéricos en el inyector y el colector) mientras que la carga se conserva en el resto del dominio.

5.1.1.4 Resultados numéricos del método explícito UD

La figuras 5.1 (a) y (b) presentan unos resultados numéricos de la formulación explícita UD del modelo a orden principal, donde en (a) aparece un pulso del campo eléctrico que viaja con un comportamiento puramente hiperbólico en la dirección de crecimiento de los pozos. Aunque el paso internodal Δx sea muy pequeño, lo cual restringe mucho el paso temporal Δt por la condición CFL al deber cumplirse en líneas generales que $\Delta t < \Delta x$, esto no es un elemento suficiente para *suavizar* la discontinuidad que presenta el perfil del campo justo en la cola del pulso observables en la figura 5.1 (a), lo cual produce oscilaciones numéricas espurias en la densidad de corriente total J_x visibles en el recuadro superior de la figura 5.1 (b). Además, el método no captura bien la velocidad a la que se propagan los perfiles del campo y la densidad, ya que los picos de la densidad de corriente total J_x varían para distintas precisiones Δx (a más precisión, los picos de J_x van apareciendo antes sin llegar a converger a una posición fija).

5.1.1.5 FVM en la versión implícita

A continuación desarrollamos un método implícito en el que el ruido numérico desaparece y el método converge capturando la velocidad del campo y de la densidad. Esto se consigue gracias a que daremos un paso espacial muy pequeño independiente del paso temporal. Una manera de aproximar la integral

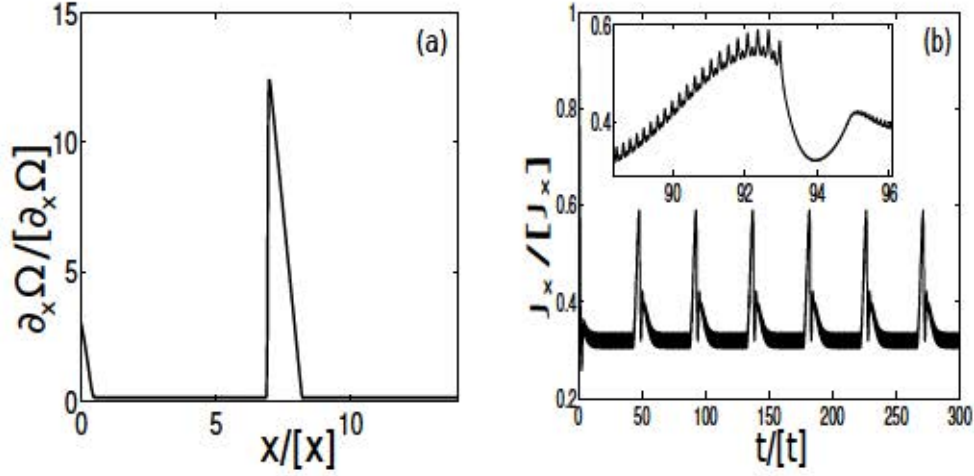


Figura 5.1: Campo (a) y densidad de corriente total (b) para el modelo convectivo mediante FVM explícito. La dependencia entre Δt y Δx hace muy costoso computacionalmente eliminar las oscilaciones numéricas espurias que se observan en la simulación.

temporal a la que se debe someter la parte de la derecha de la ley conservativa (5.12) es generalizar dicha aproximación en términos de un parámetro peso P , con $0 \leq P \leq 1$, i.e., una aproximación por peso interpolante. Por ejemplo, para $J_{nx}(\mathcal{V}(x_{i+1/2}, t), n(x_{i+1/2}, t))$ tendríamos:

$$\int_t^{t+\Delta t} dt J_{nx}(\mathcal{V}(x_{i+1/2}, t), n(x_{i+1/2}, t)) \approx \left(P J_{nx}^{x_{i+1/2}} + (1-P) J_{nx}^{0, x_{i+1/2}} \right) \Delta t,$$

donde el superíndice 0 en $J_{nx}^{x_{i+1/2}}$ denota que se evalúa en t y sin el superíndice

en $t + \Delta t$. Si lo aplicamos a la ley conservativa (5.12) y utilizamos una fórmula general para discretizar el flujo, por ejemplo en la cara *este* de una celda \mathcal{C}_i dada, $J_{nx}^k = \mathcal{V}_i^{k,E} n_i^{k,E} := J_{nx}^{k,E}$, obtenemos

$$(n_i - n_i^0) \frac{\Delta x}{\Delta t} = -P (\mathcal{V}_i^E n_i^E - \mathcal{V}_i^W n_i^W) - (1-P) (\mathcal{V}_i^{0,E} n_i^{0,E} - \mathcal{V}_i^{0,W} n_i^{0,W}). \quad (5.23)$$

Para los valores de $P = 0, 1/2, 1$ se obtiene el método explícito desarrollado en el subapartado anterior, el método de Crank-Nicolson (semi-implícito) y un método completamente implícito, respectivamente.

El método completamente implícito ($P = 1$ en (5.23)) para integrar la ecuación de transporte implica resolver la ecuación matricial $A\mathbf{n} = \mathbf{b}(\mathbf{n}^0)$ para cada paso temporal Δt , donde \mathbf{n} es el vector columna $\mathbf{n} = (n_1, \dots, n_{N_x})^T$.

Sean $a_i^W = \frac{\Delta t}{\Delta x} \mathcal{V}_i^W$, $a_i^E = \frac{\Delta t}{\Delta x} \mathcal{V}_i^E$ obtenidos de (5.23) con $P = 1$. Si optamos por utilizar un esquema UD en la parte de los flujos, i.e., $n_i^{k,E} = n_i^k$ para la cara *este* de la celda y $n_i^{k,W} = n_{i-1}^k$ para la cara *oeste*, donde $\mathcal{V} > 0$, entonces la matriz de coeficientes A y el término independiente b quedan :

$$A = \begin{pmatrix} 1 + 2a_1^E & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -a_2^W & 1 + a_2^E & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & -a_i^W & 1 + a_i^E & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -a_{N_x-1}^W & 1 + a_{N_x-1}^E & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -2a_{N_x}^W & 1 + 2a_{N_x}^W \end{pmatrix},$$

$$b = \begin{pmatrix} n_1^0 + 2\frac{\Delta t}{\Delta x} \sigma \partial_x \Omega(x=0) \\ n_2^0 \\ \vdots \\ n_i^0 \\ \vdots \\ n_{N_x-1}^0 \\ n_{N_x}^0 \end{pmatrix},$$

donde se ha considerado la condición de contorno colectora $\mathcal{V}_{N_x}^{k,E} = \mathcal{V}_{N_x}^{k,W}$. El método numérico es de orden uno tanto temporal como espacial. En la figura 5.2 se muestra el perfil de la densidad de corriente J_x en el caso unidimensional y se compara con la aproximación mediante el mismo método a la solución de las ecuaciones (4.103),(4.106) junto con las condiciones (4.107),(4.109),(4.110)-(4.112) con $\theta = \pi/2$.

Al ser el esquema implícito, es necesario conocer la velocidad y por lo tanto el potencial Ω en el mismo paso temporal que la densidad n . Para ello calculamos un valor aproximado para la densidad, $n^*(\Omega^0, n^0)$, mediante la ecuación de transporte (como antes el superíndice 0 indica que las variables están calculadas en el paso temporal anterior). Luego se calcula otro valor aproximado para el potencial $\Omega^*(n^*)$ mediante la ecuación de Poisson y luego recalculamos $n(\Omega^*, n^0)$. Por último se hace una última corrección para el potencial a partir del último valor de la densidad, $\Omega(n)$.

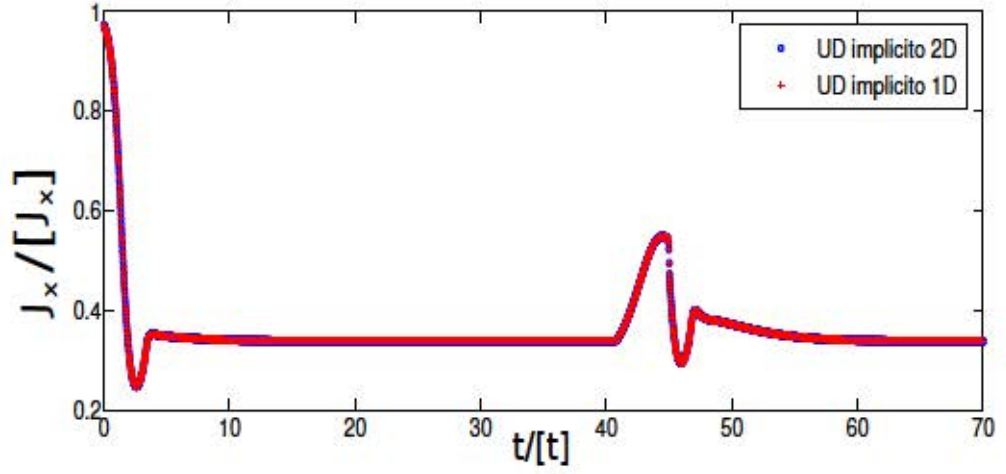


Figura 5.2: Perfil de la densidad de corriente J_x mediante UD implícito. La solución del problema bidimensional para $\theta = \pi/2$ coincide con la solución unidimensional.

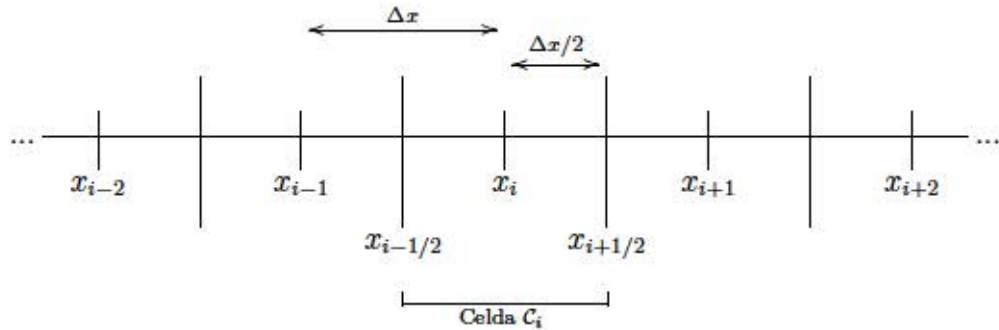
5.1.1.6 Linear Upwind Differencing (LUD) para la versión implícita

Un método de orden superior se obtiene considerando en los flujos un esquema LUD. Basta tomar

$$n_i^{k,W} = \frac{3}{2}n_{i-1}^k - \frac{1}{2}n_{i-2}^k, \quad n_i^{k,E} = \frac{3}{2}n_i^k - \frac{1}{2}n_{i-1}^k, \quad \text{con } \mathcal{V} > 0.$$

La derivación del LUD es sencilla y se puede considerar como una extensión cuadrática del UD. Para $n_i^{k,E}$ simplemente tomamos la siguiente corrección de $n_{i+1/2}^k = n^k(x_{i+1/2})$ en su desarrollo de Taylor en el punto x_i obteniendo

$$n_i^{k,E} = n_i^k + \frac{n_i^k - n_{i-1}^k}{\Delta x} \frac{\Delta x}{2} = \frac{3}{2}n_i^k - \frac{1}{2}n_{i-1}^k.$$



De la misma manera se obtiene $n_i^{k,W} = \frac{3}{2}n_{i-1}^k - \frac{1}{2}n_{i-2}^k$. Se puede observar que no todos los coeficientes de los nodos tienen el mismo signo, pudiendo dar pequeñas oscilaciones espurias en los perfiles de la densidad y del campo [44]. Esto se subsana dando un paso espacial Δx suficientemente pequeño. En la figura 5.3 (b) se muestra el campo a diferentes tiempos donde se aprecia el carácter puramente hiperbólico. Dicho esquema es de orden espacial cuadrático (ver figura 5.3 (c)). Para las celdas que están en los extremos del dominio se considerará el método UD, que aunque sea de primer orden, el método implícito preserva el orden del LUD. En la figura 5.3 (a) se compara el método implícito con flujo LUD con un método utilizado para problemas unidimensionales integrodiferenciales propuesto por Carpio et al [50] (al que nos referiremos a partir de ahora como CHK).

5.1.2 FVM 1D para ecuaciones convectivo-difusivas

Analizamos la implementación del método de los volúmenes finitos explícito, tomando $P = 1$ en la ecuación (5.23), para ecuaciones convectivo-difusivas a partir de las ecuaciones del modelo anterior donde a la ecuación de continuidad (5.11) le añadimos artificialmente un término difusivo:

$$\partial_t n + \partial_x \left(\frac{2 \partial_x \Omega}{1 + (\partial_x \Omega)^2} n - \frac{2 K_B T}{\hbar \nu_e \tau_e} \frac{\partial_x n}{1 + (\partial_x \Omega)^2} \right) = 0. \quad (5.24)$$

El coeficiente del término difusivo obedece la relación de Einstein [40]. Debido a la implementación de dicho término difusivo ya no existe una dirección privilegiada por donde viaja la información, por lo que es razonable utilizar para los perfiles de la densidad electrónica n en la parte convectiva de la ecuación medias aritméticas en vez de una función lineal y un limitador de flujo.

La inserción de las medias

$$\tilde{n}_i^{k,W} := \frac{n_{i-1}^k + n_i^k}{2}, \quad (5.25)$$

$$\tilde{n}_i^{k,E} := \frac{n_i^k + n_{i+1}^k}{2}, \quad (5.26)$$

para el perfil de n en los flujos evaluados en las interfaces $x_{i-1/2}$ y $x_{i+1/2}$, respectivamente, resulta equivalente a un esquema de diferencias finitas centradas. Con ello se consigue una precisión espacial de segundo orden, tal como muestra la figura 5.5 (a).

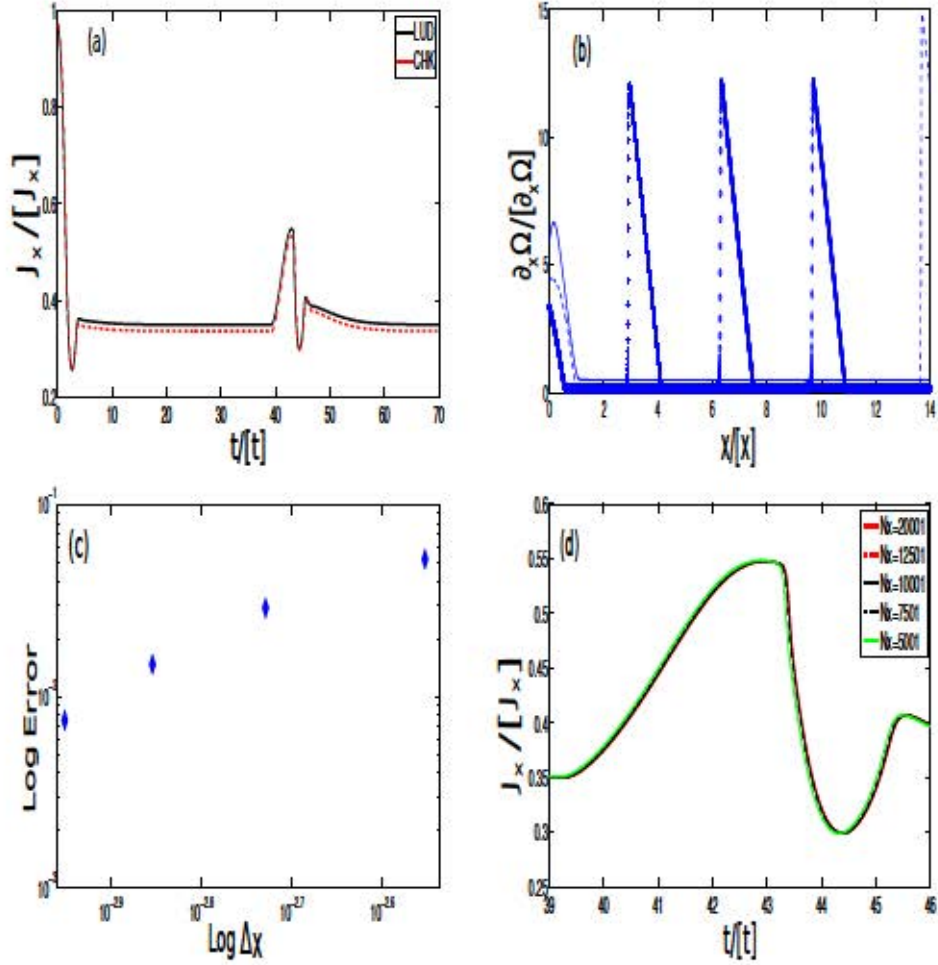


Figura 5.3: (a) Comparación de los métodos LUD y CHK para el caso hiperbólico. (b) Transporte del pulso del campo, mostrado a distintos tiempos t con distintos perfiles del campo eléctrico con símbolos $+$, \circ , \diamond y línea discontinua, para el método implícito utilizando LUD. El campo de línea discontinua corresponde al momento del reciclaje (c) Errores espaciales del método implícito con LUD. La convergencia es cuadrática (≈ 2.08). (d) LUD: distintos perfiles de la densidad de corriente J_x para distintas precisiones. Los perfiles convergen para una cantidad de nodos espaciales alto.

5.1.2.1 Implementación del término difusivo

Para obtener un perfil de la derivada parcial de la densidad electrónica, $\partial_x n$, haremos lo mismo que con la implementación de la derivada del potencial: escogemos diferencias regresivas para la interfase $x_{i-1/2}$ y diferencias progresivas para la interfase $x_{i+1/2}$ de la celda C_i y las denotaremos como $\partial_x n_i^{k,W}$ y

$\partial_x n_i^{k,E}$, con lo que

$$\partial_x n_i^{k,W} := \frac{n_i^k - n_{i-1}^k}{\Delta x} \quad (5.27)$$

$$\partial_x n_i^{k,E} := \frac{n_{i+1}^k - n_i^k}{\Delta x} \quad (5.28)$$

Sea $\mathcal{G} = \frac{2 K_B T}{\hbar \omega_e \tau_e}$, entonces el esquema numérico queda:

$$\begin{aligned} n_i^{k+1} = & n_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\left(\mathcal{V}_i^{k,E} \tilde{n}_i^{k,E} - \mathcal{G} \frac{\partial_x n_i^{k,E}}{1 + \left(\partial_x \Omega_i^{k,E} \right)^2} \right) \right. \\ & \left. - \left(\mathcal{V}_i^{k,W} \tilde{n}_i^{k,W} - \mathcal{G} \frac{\partial_x n_i^{k,W}}{1 + \left(\partial_x \Omega_i^{k,W} \right)^2} \right) \right] \end{aligned}$$

5.1.2.2 Condición de contorno y resultados numéricos

De manera análoga a como se hizo en la versión puramente convectiva obtenemos la condición de contorno en $x = 0$:

$$n_1^{k+1} = n_1^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\left(\mathcal{V}_1^{k,E} \tilde{n}_1^{k,E} - \mathcal{G} \frac{\partial_x n_1^{k,E}}{1 + \left(\partial_x \Omega_1^{k,E} \right)^2} \right) - \sigma \partial_x \Omega_1^k \right].$$

Los gráficos de la figura 5.4 (a) muestran perfiles suaves del campo debido a la inclusión artificial del término difusivo y la desaparición del ruido numérico debido al método explícito en el caso hiperbólico en las oscilaciones autosustentadas de la densidad de corriente total J_x en figura 5.4 (b). Analizando los errores de J_x mostrados en la figura 5.5 (a) se calcula que el orden de convergencia del método es cuadrático (≈ 2.08) en Δx y de primer orden (≈ 1.03) en Δt .

5.1.3 FVM 1D para el modelo a primer orden

Todo lo visto hasta ahora es suficiente para poder abordar el problema utilizando la corrección en el flujo J_{nx} (4.115) hasta primer orden usando un esquema FVM explícito. Podemos reescribir la relación constitutiva del flujo en la forma

$$J_{nx} = \mathcal{A} n + \mathcal{B} \partial_x n + \mathcal{C} (J_x - \mathcal{A} n) n + \mathcal{D} (n - 1) n + \mathcal{E} \quad (5.29)$$

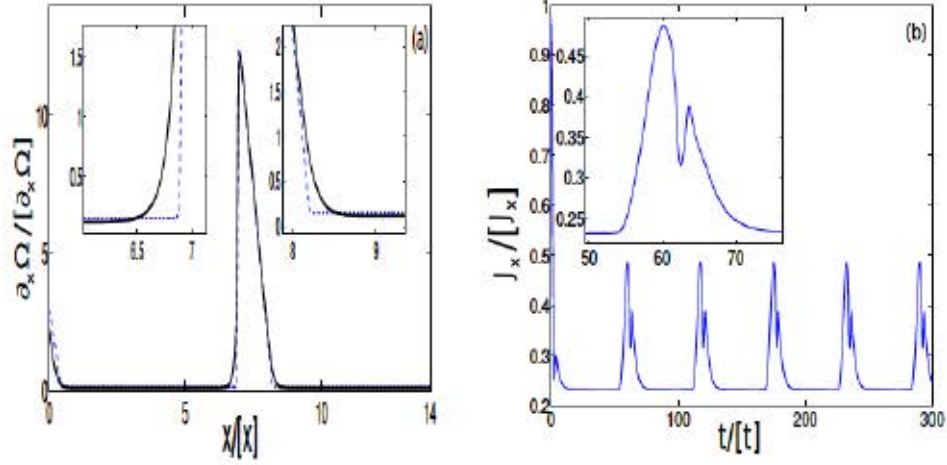


Figura 5.4: Resolución numérica mediante FVM explícito de la ecuación de convección-difusión con término *einsteiniano*. (a): Comparación de los perfiles del campo con término convectivo (línea discontinua) y con la inclusión del término difusivo (línea continua). (b): Perfil de la densidad de corriente para la ecuación de convección-difusión.

donde los coeficientes \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} , \mathcal{D} y \mathcal{E} son

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A} &= \frac{2 \partial_x \Omega}{1 + (\partial_x \Omega)^2}, \\
 \mathcal{B} &= -\delta_1 \left(1 - \frac{I_2}{I_0} \frac{1 - 2 (\partial_x \Omega)^2}{1 + 4 (\partial_x \Omega)^2} - \frac{2 I_1^2 (1 + \tau_e^{-2})}{I_0^2} \frac{(\partial_x \Omega)^2}{(1 + (\partial_x \Omega)^2)^2} \right) \frac{1}{1 + (\partial_x \Omega)^2}, \\
 \mathcal{C} &= -\delta_2 \frac{1 - (1 + 2 \tau_e^2) (\partial_x \Omega)^2}{(1 + (\partial_x \Omega)^2)^3}, \\
 \mathcal{D} &= -\frac{\delta_3}{\varphi} \left(\frac{I_2}{I_1} \frac{5 - 4 (\partial_x \Omega)^2}{(1 + 4 (\partial_x \Omega)^2)^2} - \frac{(1 + \tau_e^{-2}) I_1}{I_0} \frac{1 - (\partial_x \Omega)^2}{(1 + (\partial_x \Omega)^2)^3} \right) \frac{\partial_x \Omega}{1 + (\partial_x \Omega)^2}, \\
 \mathcal{E} &= \frac{\delta_4}{1 + (\partial_x \Omega)^2} \left\{ (-\tau_e^{-2} + (2 + \tau_e^2) (\partial_x \Omega)^2) \frac{2 \partial_x \Omega \mathcal{V}_z \partial_z n}{(1 + (\partial_x \Omega)^2)^2} \right. \\
 &\quad + \frac{2n}{\tau_e^2 (1 + (\partial_x \Omega)^2)^3} [(-1 - \tau_e^2 + (3 + 5 \tau_e^2 + 4 \tau_e^4 - 2 \tau_e^2 (\partial_x \Omega)^2) (\partial_x \Omega)^2) \mathcal{V}_z \partial_z \partial_x \Omega \\
 &\quad \left. + (1 + (\partial_x \Omega)^2) (-1 + \tau_e^2 (2 + \tau_e^2) (\partial_x \Omega)^2) \partial_x \Omega \partial_z \mathcal{V}_z] \right\}.
 \end{aligned}$$

Además se ha tenido en cuenta que $\mathcal{Q}_x = \partial_x \Omega$ (por la adimensionalización de la tabla (4.2)) y que debido al carácter unidimensional se ha reformulado el término $\partial_{xx} \Omega$ como $\frac{n-1}{\varphi}$ y despreciado el término \mathcal{E} .

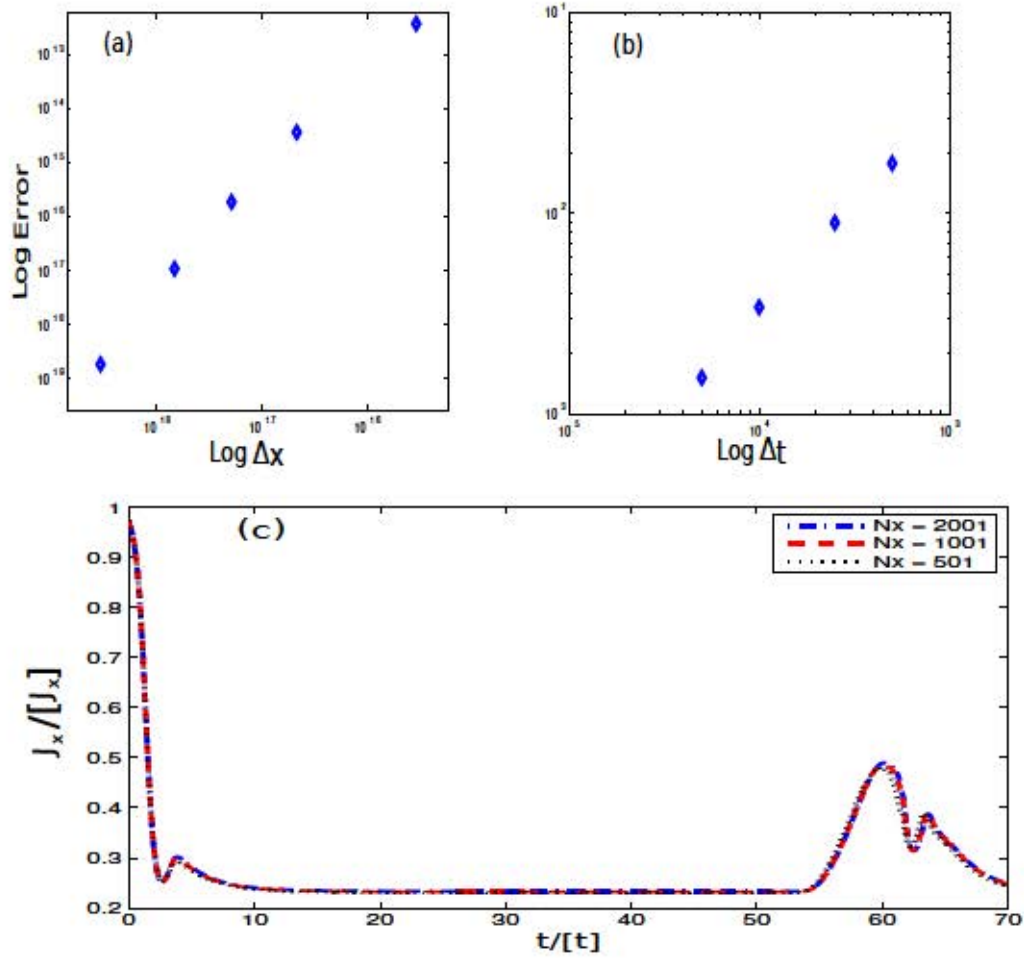


Figura 5.5: Errores y aproximaciones del FVM explícito al problema con término difusivo *einsteiniano*. (a): Convergencia espacial cuadrática. (b): Convergencia temporal de primer orden. (c): Soluciones numéricas de J_x con distinto número de nodos.

De la misma manera que en los dos anteriores apartados, el problema consiste en resolver la ecuación de continuidad unidimensional

$$\partial_t n + \partial_x J_{nx} = 0, \quad (5.30)$$

con la relación constitutiva (5.29), junto con la ecuación de Poisson

$$\partial_{xx} \Omega = \frac{n-1}{\varphi}, \quad (5.31)$$

las condiciones de contorno (5.1)-(5.4)

$$\begin{aligned}\Omega(0, z, t) &= 0, \\ \Omega(N, z, t) &= \frac{e}{\hbar\nu_e\tau_e}V - \frac{e^2B^2l^2N^2}{2m\hbar\nu_e\tau_e}, \\ J_{nx} &= \sigma\partial_x\Omega \quad \text{en } x=0, \\ J_{nx} &= \sigma\left(\partial_x\Omega + \frac{e^2l^2B^2N}{m\hbar\nu_e\tau_e}\right) \quad \text{en } x=N,\end{aligned}$$

y la condición inicial $n(x, t=0) = 1$.

5.1.3.1 Esquema numérico del FVM para el problema a primer orden.

Para obtener el esquema numérico de la ecuación general de convección-difusión (5.30) basta con escribir los flujos en las interfaces tal y como hemos hecho hasta ahora, con lo que

$$\begin{aligned}n_i^{k+1} &= n_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\left(\mathcal{A}_i^{k,E} \tilde{n}_i^{k,E} + \mathcal{B}_i^{k,E} \partial_x n_i^{k,E} \right. \right. \\ &\quad + \left. \mathcal{C}_i^{k,E} \left(J_x^k - \mathcal{A}_i^{k,E} \tilde{n}_i^{k,E} \right) \tilde{n}_i^{k,E} + \mathcal{D}_i^{k,E} (\tilde{n}_i^{k,E} - 1) \tilde{n}_i^{k,E} \right) \\ &\quad - \left(\mathcal{A}_i^{k,W} \tilde{n}_i^{k,W} + \mathcal{B}_i^{k,W} \partial_x n_i^{k,W} + \mathcal{C}_i^{k,W} \left(J_x^k - \mathcal{A}_i^{k,W} \tilde{n}_i^{k,W} \right) \tilde{n}_i^{k,W} \right. \\ &\quad \left. \left. + \mathcal{D}_i^{k,W} (\tilde{n}_i^{k,W} - 1) \tilde{n}_i^{k,W} \right) \right],\end{aligned}\tag{5.32}$$

donde por ejemplo $\mathcal{A}_i^{k,W/E} = \frac{2\partial_x\Omega_i^{k,W/E}}{1 + \left(\partial_x\Omega_i^{k,W/E}\right)^2}$ y con $\partial_x n_i^{k,W/E}$ y $\tilde{n}_i^{k,W/E}$

definidos en (5.25)-(5.28).

Calculamos la densidad de corriente total J_x a tiempo $t=0$ a partir de la relación de Ampère $(\varphi\partial_t\partial_x\Omega + J_{nx})|_{x=0} = J_x$, ya que J_x solo depende de t , i.e., $J_x = J_x(t)$. Nótese que se necesitará el campo a tiempo $t = \Delta t$, por lo que debemos obtener el campo $\partial_x\Omega(t = \Delta t)$ resolviendo numéricamente la ley de Ampère unidimensional (los términos izquierdo y derecho de la primera igualdad de (5.33)):

$$\varphi\partial_t\partial_x\Omega + J_{nx} = (\varphi\partial_t\partial_x\Omega + J_{nx})|_{x=0} = J_x.\tag{5.33}$$

Para ello utilizaremos un método explícito de diferencias finitas de segundo orden espacial junto con la condición integral $\int_0^N dx \partial_x\Omega(x, t=0) = V \frac{e}{\hbar\nu_e\tau_e} -$

$\frac{e^2 B^2 n^2 l^2}{2m\hbar\nu_e\tau_e}$, y donde las variables n y $\partial_x n$ en la relación constitutiva (5.29) las sustituimos por las derivadas del campo $\partial_x \Omega$ mediante la ecuación de Poisson.

Para tiempos $t \geq \Delta t$ calculamos numéricamente J_x mediante su relación integral con el flujo J_{nx} :

$$J_x(t) = \frac{1}{N} \int_0^N dx J_{nx}(x, t). \quad (5.34)$$

Es fácil comprobar que este esquema es conservativo exactamente en el mismo sentido que en (5.22). Es decir, la diferencia de carga entre dos pasos temporales consecutivos es $\Delta t \left(-2J_{nx}^k + J_{nx}^k + J_{nx}^k \right)$, con lo que el inyector y el colector (i.e., las dos caras de la celda C_1 y la cara *oeste* de la celda C_{N_x} respectivamente) son los que causan una modificación en la carga neta.

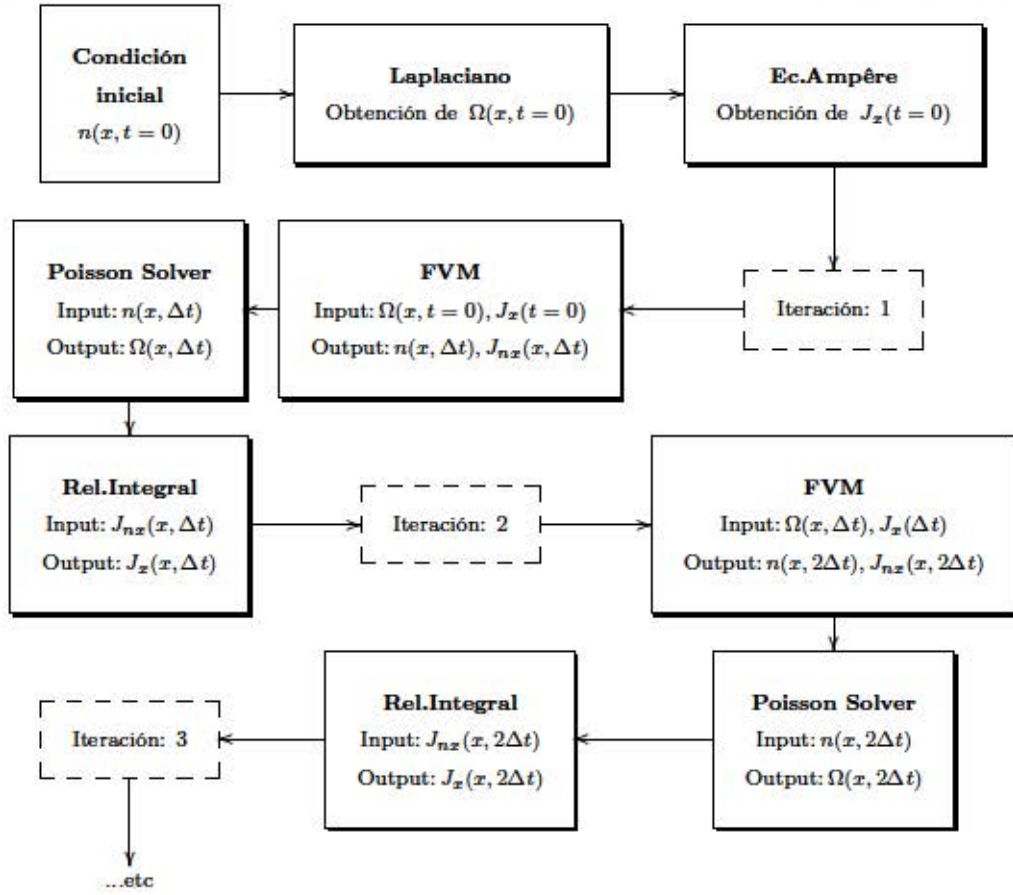
5.1.3.2 Condiciones de contorno y diagrama del flujo numérico

La condición inyectora la obtenemos de manera análoga a los anteriores apartados:

$$\begin{aligned} n_1^{k+1} &= n_1^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\left(\mathcal{A}_1^{k,E} \tilde{n}_1^{k,E} + \mathcal{B}_1^{k,E} \partial_x n_1^{k,E} \right. \right. \\ &\quad + \left. \left. \mathcal{C}_1^{k,E} \left(J_x^k - \mathcal{A}_1^{k,E} \tilde{n}_1^{k,E} \right) \tilde{n}_1^{k,E} + \mathcal{D}_1^{k,E} (\tilde{n}_1^{k,E} - 1) \tilde{n}_i^{k,E} \right) \right. \\ &\quad \left. - \sigma \partial_x \Omega_1^k \right]. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Para la condición colectora también consideraremos que el flujo total en la última celda es cero, con lo que $n_{N_x}^{k+1} = n_{N_x}^k$.

El flujo numérico del algoritmo comienza con la densidad inicial de electrones que nos lleva a considerar el Laplaciano de Ω y la ecuación de Ampère para obtener el potencial eléctrico y la densidad de corriente total J_x respectivamente. El potencial eléctrico sirve de *input* para la ecuación de continuidad (5.30), y ésta nos devuelve como *output* la densidad de electrones n . Y así el proceso se repite sucesivamente. En forma esquemática:



5.1.3.3 Resultados numéricos del problema a primer orden.

La figura 5.6 muestra las oscilaciones de la corriente total J_x al resolver la ecuación de transporte unidimensional con la relación constitutiva de J_{nx} a primer orden mediante FVM y su correspondiente evolución del campo eléctrico y densidad electrónica. El comportamiento de la superred es muy similar al observado en el efecto Gunn: durante cada periodo de las oscilaciones, un dominio del campo es nucleado cerca del cátodo y avanza en el interior de la superred con velocidad y forma constante hacia el ánodo. La figura 5.6 (c) muestra la densidad electrónica durante un periodo de oscilación. Se observa que dicho perfil, correspondiente a un pulso del campo eléctrico, es una onda dipolar la cual es $n > 1$ detrás del pico del campo eléctrico, $0 < n < 1$ delante del pico y el máximo local de la densidad electrónica se alcanza algo más tarde que el pico del pulso del campo. A partir del cálculo de los errores de las distintas aproximaciones de J_x (ver figuras 5.7 (c) y (d)) se observa que el orden de convergencia del método es cuadrático (≈ 2.37) en Δx y de primer orden (≈ 1.05) en Δt .

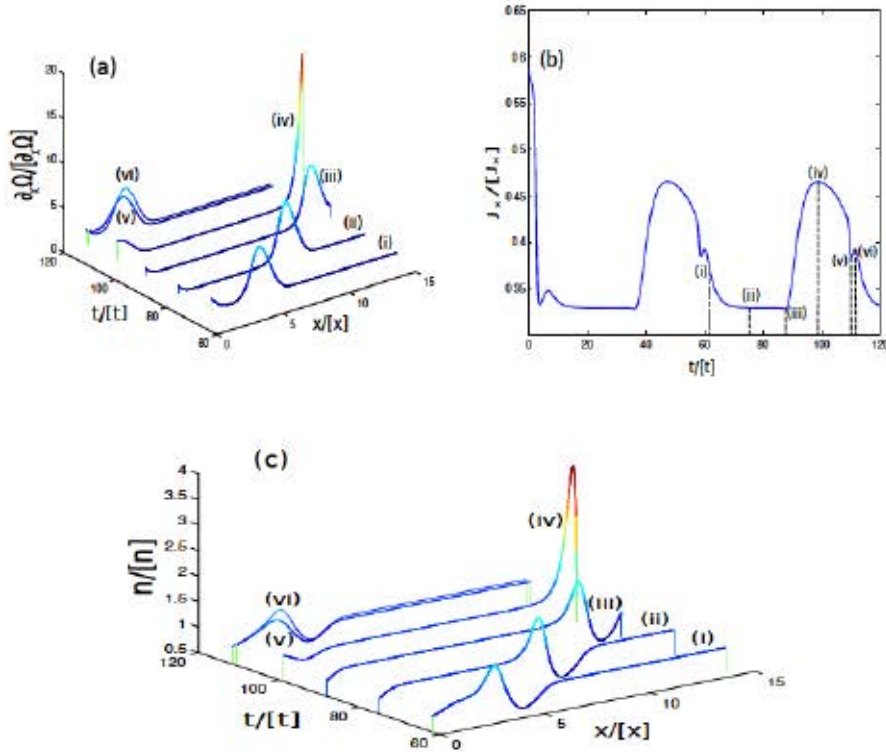


Figura 5.6: Soluciones numéricas del : (a) campo eléctrico, (b) densidad corriente total y (c) densidad electrónica para el modelo general de convección-difusión con los mismos tiempos marcados $t/[t] = \{62, 75, 88, 99, 110.4, 111.7\}$.

En la figura 5.8 se muestra un rango de valores de los voltajes V donde ocurre la dinámica descrita. Se comienza con un voltaje igual a $3.6V$ y se va incrementando en $0.035V$. Se observa que a un incremento del voltaje la frecuencia de las oscilaciones disminuye, lo que se traduce en una velocidad menor de los pulsos. Este rango de valores corresponde a la zona de *movilidad diferencial negativa* [34].

Por último comparamos el FVM con el método de CHK de [50] para problemas integro-diferenciales relacionados con nuestro modelo. Implementamos el esquema de CHK: el método resuelve la ley de Ampère (4.104) junto con la condición integral $\int_0^N dx \partial_x \Omega = V \frac{e}{\hbar \nu_e \tau_e} - \frac{e^2 B^2 n^2 l^2}{2m \hbar \nu_e \tau_e}$ utilizando diferencias finitas centradas para la aproximación de las derivadas espaciales. La ecuación diferencial es integrada en el tiempo por un método de Euler implícito de primer orden. Presenta la ventaja de que, al ser un esquema implícito,

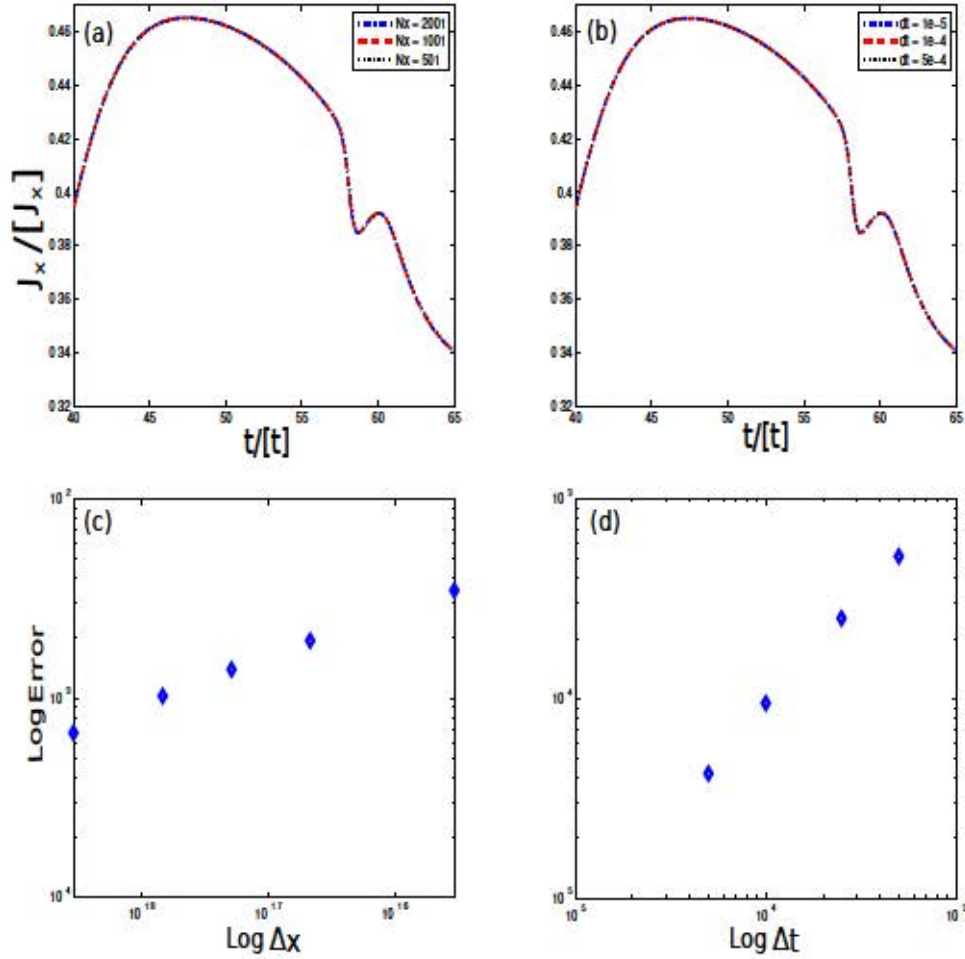


Figura 5.7: Resultados numéricos para el modelo a primer orden y convergencia de los errores del método FVM explícito utilizado. Las figuras (a) y (b) muestran distintas soluciones numéricas de J_x para distintas precisiones espacial y temporal respectivamente, donde no se observan diferencias cualitativas en los perfiles. Las figuras (c) y (d) muestran las convergencias espacial cuadrática (≈ 2.37) y temporal de primer orden (≈ 1.05) del método numérico.

la condición CFL para asegurar estabilidad es mucho más relajada con lo que, fijado una precisión espacial, el paso temporal podrá tomarse mayor que en el FVM explícito.

Al comparar los dos métodos en la figura 5.9 se observa que las amplitudes de las oscilaciones de la corriente son idénticas pero las frecuencias son sensiblemente distintas. Eso se debe a que la velocidad a la que se propagan los pulsos del campo no son del todo iguales en los dos métodos ya que para el método FVM las oscilaciones estacionarias aparecen para valores

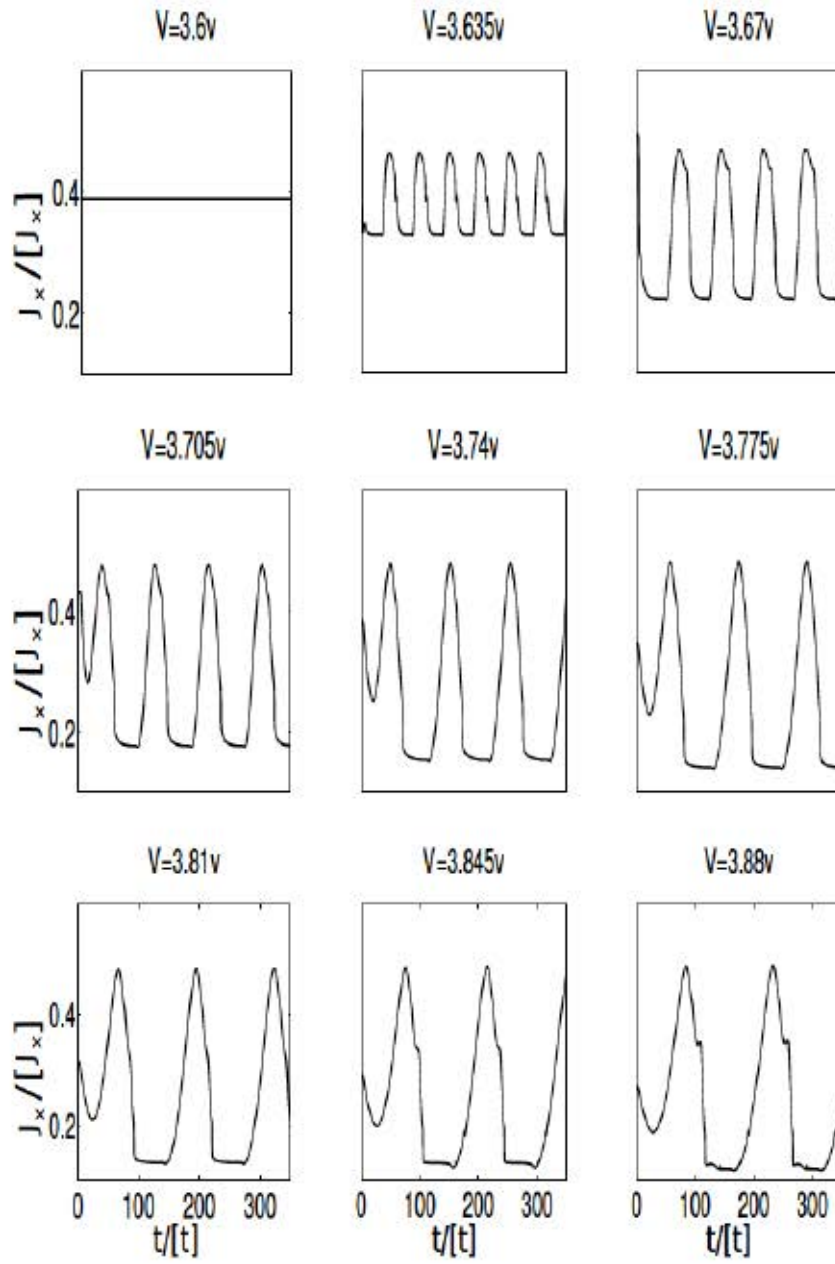


Figura 5.8: Rango de voltajes donde suceden oscilaciones autosostenidas de la corriente total J_x .

sensiblemente inferiores del parámetro V (ver figura 5.10).

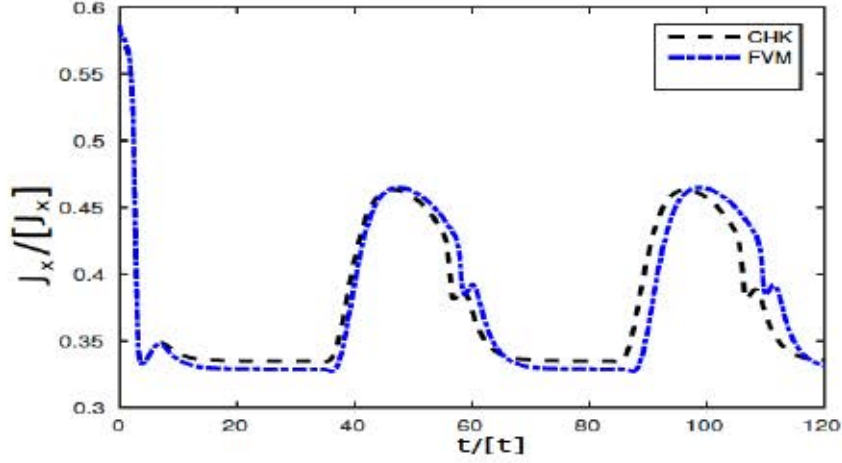


Figura 5.9: Comparación entre los métodos FVM y CHK para el problema a primer orden. La amplitud de la corriente es igual en los dos métodos mientras que la frecuencia de las oscilaciones es levemente distinta.

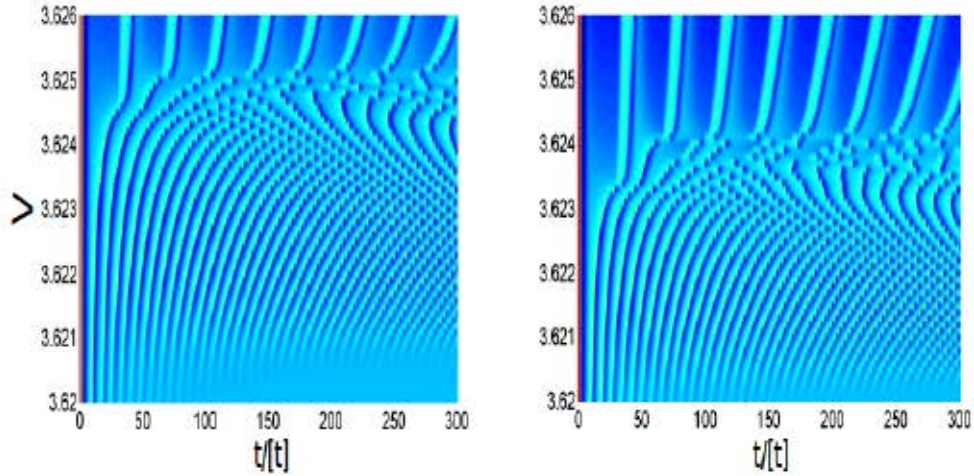


Figura 5.10: Valores de J_x versus tiempo donde se varía el voltaje V . Los colores cálidos o claros indican valores altos de J_x . Las auto-oscilaciones comienzan para valores superiores a $V = 3.625 V$ en el método de CHK (izquierda) mientras que en el de FVM (derecha) comienzan para valores ligeramente inferiores.

5.2 Esquema 2D

Debido a la influencia del campo magnético inclinado entre el eje x , dirección de crecimiento de los pozos, y el eje z , el comportamiento de la densidad electrónica y del campo eléctrico puede abarcar esta vez todo el dominio bidimensional generado por el plano XZ . La elección de un método numérico eficiente será crucial para poder realizar una descripción cualitativa de la dinámica electrónica. En los anteriores apartados se vio que un método de volúmenes finitos para el modelo 1D permitía integrar tanto la versión hiperbólica como la del modelo a primer orden de manera eficaz.

Las razones por la que se ha elegido un método basado en volúmenes finitos son varias. En general, los métodos FVM ofrecen ventajas en su adaptabilidad a problemas de más de una dimensión, en el hecho de que no se desarrollan los operadores diferenciales de las ecuaciones a integrar numéricamente o en la sencillez en la implementación de un mallado no uniforme. Hay otros aspectos más particulares relativos a cada tipo de problema. Consideremos la implementación de las condiciones de contorno de nuestro problema. Si el ángulo θ entre el campo magnético y la dirección de crecimiento de los pozos es estrictamente menor que $\pi/2$, entonces de (4.107) y de igualar $x = 0$ en (4.113) se obtiene la siguiente relación para la densidad electrónica en el inyector

$$n(x=0, z, t) = \frac{1 + \partial_x \Omega_{|x=0}^2}{2\partial_x \Omega_{|x=0}} \sigma \left(\partial_x \Omega_{|x=0} - \beta z \sin \theta \cos \theta \right) ,$$

con lo que si $0 < \theta < \pi/2$ la densidad electrónica en el inyector no estará definida cuando el campo eléctrico $\partial_x \Omega$ en alguna región de dicho contacto se anule. Al utilizar un método de volúmenes finitos las condiciones de contorno del flujo, ecuaciones (4.107)-(4.109) o ecuaciones (5.41)-(5.42), se pueden implementar directamente en el algoritmo numérico, evitando utilizar una relación explícita para la densidad n .

En esta sección se detalla la implementación del FVM para describir cualitativamente el transporte electrónico en un campo magnético considerando solo el término principal en las relaciones constitutivas para la densidad de corriente, i.e., el problema en su versión puramente convectiva.

Los parámetros de *scattering* dependen de la intensidad del campo B [21]. Por lo tanto, hacer distintos cálculos con distintas intensidades magnéticas significa que los parámetros de colisión ν_e , ν_p pueden variar. Además, al variar la intensidad magnética B , los valores numéricos de las escalas también pueden cambiar respecto de la tabla (4.2) aunque no dependan de las frecuencias ν_e , ν_p . En la parte superior de la tabla (5.1) aparecen las escalas

para un valor de $B = 2T$.

5.2.1 Ecuaciones adimensionales del problema 2D: modelo convectivo

De la sección (4.7.1) obtuvimos las ecuaciones adimensionalizadas a integrar, que son

$$\partial_t n + \partial_x J_{nx} + \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} \partial_z J_{nz} = 0, \quad (5.36)$$

$$\partial_{xx} \Omega + \frac{l^2}{L_z^2} \partial_{zz} \Omega = \frac{n-1}{\varphi}, \quad (5.37)$$

donde $\frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} = \frac{l}{L_z} \frac{4\hbar^2 \tau_e^2 I_0}{m \Delta l L_z I_1} \approx 6.7133 \times 10^{-6}$, $\frac{l^2}{L_z^2} \approx 1.7222 \times 10^{-7}$, $\varphi = \frac{\varepsilon \hbar \nu_e \tau_e}{e^2 l^2 [n]} \approx 0.9845$ para los valores de la tabla (5.1), junto con las relaciones a orden principal

$$J_{nx}^{(0)} = 2n \frac{\partial_x \Omega}{1 + (\partial_x \Omega)^2}, \quad (5.38)$$

$$J_{nz}^{(0)} = n \partial_z \Omega. \quad (5.39)$$

Las condiciones inicial y de contorno para la ecuación de transporte son

$$n(x, z, 0) = 1 \quad (5.40)$$

$$J_{nx}(0, z, t) = \sigma (\partial_x \Omega(0, z, t) - \beta z \sin \theta \cos \theta), \quad (5.41)$$

$$J_{nx}(N, z, t) = \sigma \left[\partial_x \Omega(N, z, t) - \beta \left(z \cos \theta - \frac{Nl}{L_z} \sin \theta \right) \sin \theta \right], \quad (5.42)$$

$$J_{nz}(x, \pm \frac{1}{2}, t) = 0, \quad (5.43)$$

y las de contorno de la ecuación de Poisson

$$\Omega(0, z, t) = -\beta \frac{L_z}{2l} \cos^2 \theta z^2, \quad (5.44)$$

$$\Omega(N, z, t) = \frac{e}{\hbar \nu_e \tau_e} V - \beta \frac{L_z}{2l} \left(\frac{Nl}{L_z} \sin \theta - z \cos \theta \right)^2, \quad (5.45)$$

$$\partial_z \Omega(x, \pm 1/2, t) = \beta \left(x \sin \theta \mp \frac{L_z}{2l} \cos \theta \right) \cos \theta, \quad (5.46)$$

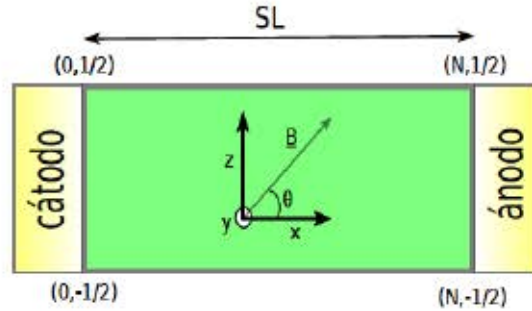


Figura 5.11: Dominio adimensionalizado del problema.

donde $\beta = \frac{e^2 B^2 l L_z}{m \hbar \nu_e \tau_e} \approx 147.86 \times B^2$, $\varphi \approx 0.9845$, $\frac{e}{\hbar \nu_e \tau_e} \approx 339.3201$ para los valores de la tabla (5.1) y siendo V y σ parámetros libres. Las ecuaciones escalares de Ampère y la ecuación de divergencia nula son:

$$\varphi \partial_t \partial_x \Omega + J_{nx} = J_x, \quad (5.47)$$

$$\varphi \frac{l}{L_z} \frac{[v_x]}{[v_z]} \partial_t \partial_z \Omega + J_{nz} = J_z, \quad (5.48)$$

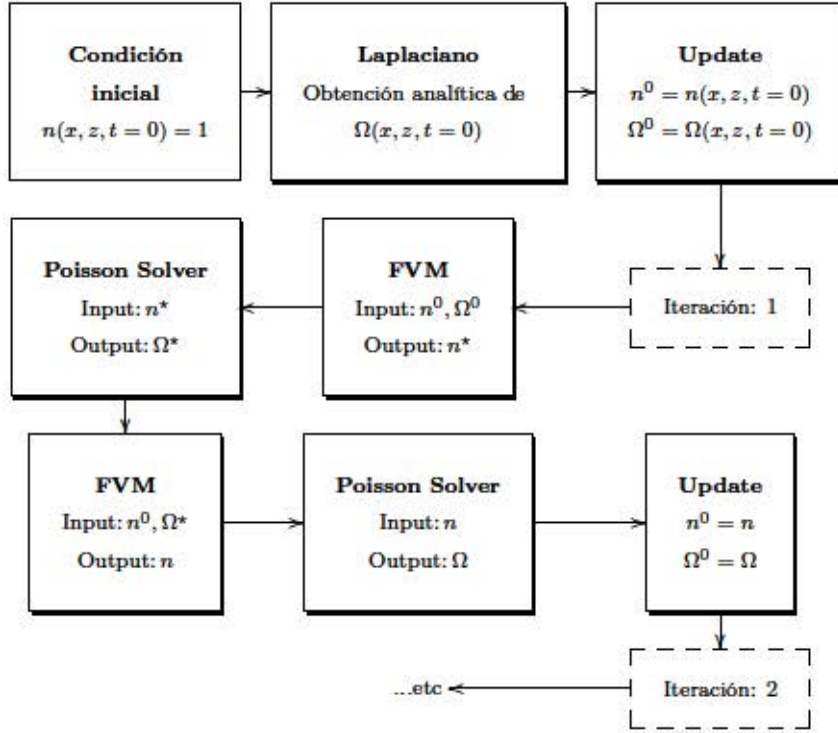
$$\nabla \cdot \underline{J}_x = 0, \quad (5.49)$$

donde $\varphi \frac{l}{L_z} \frac{[v_x]}{[v_z]} \approx 6.609 \times 10^{-6}$. El dominio sin dimensiones es $0 \leq x \leq N$, $-1/2 \leq z \leq 1/2$, esquematizado en la figura (5.11). El ángulo entre el campo magnético \underline{B} y el eje $z = 0$ será en el resto del capítulo $0 \leq \theta < \pi/2$.

5.2.2 Integración numérica del modelo convectivo

En este apartado se explicarán los métodos empleados en la integración de las ecuaciones diferenciales, poniendo especial interés en el FVM implícito para resolver la ecuación de transporte bidimensional.

Para tener una visión global del procedimiento se muestra a continuación un esquema general del proceso numérico para resolver el par de ecuaciones acopladas (5.36) y (5.37), junto con las relaciones constitutivas (5.38) y (5.39), la condición inicial (5.40) y las condiciones de contorno (5.41)-(5.43) y (5.44)-(5.46):



5.2.3 Malla no uniforme y resolución numérica de la ecuación de Poisson

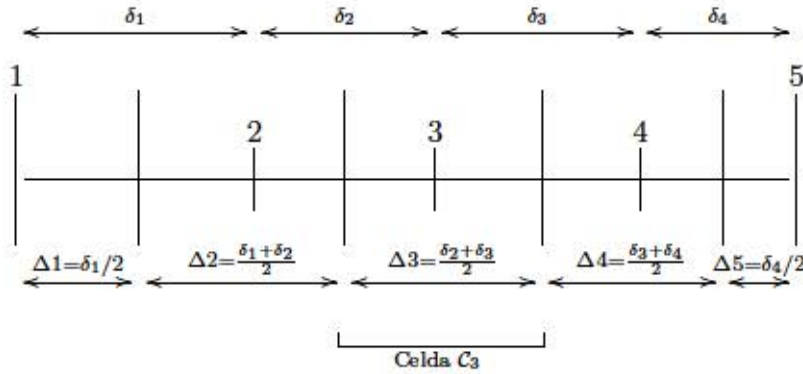
El coste computacional es elevado para la resolución del problema bidimensional. Por lo tanto, para aligerar el tiempo de computación se opta por construir un mallado no uniforme con más densidad de nodos allá donde aparezcan fuertes gradientes en la densidad electrónica. Resultados numéricos previos mostrarán que existe una intensidad magnética crítica B_c a partir de la cual para cualquier valor que se tome $B \geq B_c$, se formará un confinamiento electrónico dando lugar a un canal de densidad de carga entre los contactos donde la inclinación dependerá del ángulo del campo magnético y la anchura máxima de su intensidad. El canal será más estrecho según se esté más cerca de los contactos y sus extremos estarán definidos por los máximos respecto de la dirección z del potencial eléctrico Ω en los contactos. Dichos máximos se pueden calcular directamente ya que el potencial tanto en el inyector como en el colector están definidos por las condiciones Dirichlet (5.44) y (5.45) respectivamente. En esas dos regiones de los contactos aparecerán fuertes gradientes, por lo que definiremos un mallado de mayor densidad de nodos en ellas. Para la construcción de la nueva malla nos basaremos en un

clustering nodal definido en [51].

La ecuación de Poisson (5.37) está acoplada con la ecuación de transporte ya que el lado derecho de la ecuación depende de la densidad electrónica n . Para la integración de dicha ecuación junto con las condiciones (5.44)-(5.46) utilizaremos un esquema de diferencias finitas a primer orden para aproximar las derivadas parciales y así implementar de manera cómoda la malla no uniforme. Utilizaremos un método directo: construiremos una matriz a partir de las ecuaciones algebraicas resultantes y la invertiremos para hallar la aproximación del potencial eléctrico Ω .

5.2.4 Resolución de la ecuación de transporte mediante Upwind Differencing FVM Implícito

Tal como se ha dicho antes, se utilizará una malla no uniforme para la integración de las ecuaciones. Supongamos una malla con tan solo cinco nodos, etiquetados del 1 al 5, con espaciado internodal δ_k , $1 \leq k \leq 4$. Igual como se hizo en el capítulo anterior construimos las celdas con las interfaces internodales. Del siguiente diagrama



podemos inferir la relación de los pasos Δx y Δz siguiente:

$$\begin{aligned} \Delta x_i &= \frac{\delta_{i-1}^x + \delta_i^x}{2}, \quad 2 \leq i < N_x, \\ \Delta x_1 &= \delta_1^x/2, \quad \Delta x_{N_x} = \delta_{N_x-1}^x/2, \\ \Delta z_j &= \frac{\delta_{j-1}^z + \delta_j^z}{2}, \quad 2 \leq j < N_z, \\ \Delta z_1 &= \delta_1^z/2, \quad \Delta z_{N_z} = \delta_{N_z-1}^z/2. \end{aligned}$$

De la primera parte del presente capítulo se extiende el esquema numérico con aproximación por peso interpolante (5.23) a la ecuación de transporte bidimensional (5.36). Para otras derivaciones del método numérico de volúmenes finitos en su versión bidimensional consultar [44]. El esquema general bidimensional, utilizando la notación $n^0 = n^k$ y $n = n^{k+1}$, es:

$$\begin{aligned} n_{i,j} - n_{i,j}^0 = & -P \left\{ \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left[J_{i,j}^E - J_{i,j}^W \right] + \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} \frac{\Delta t}{\Delta z_j} \left[J_{i,j}^N - J_{i,j}^S \right] \right\} \\ & - (1-P) \left\{ \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left[J_{i,j}^{0,E} - J_{i,j}^{0,W} \right] + \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} \frac{\Delta t}{\Delta z_j} \left[J_{i,j}^{0,N} - J_{i,j}^{0,S} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.50)$$

donde los superíndices E, W, N, S denotan las caras este, oeste, norte y sur respectivamente de la celda $\mathcal{C}_{i,j}$. Del esquema (5.50) obtenemos el esquema completamente implícito siguiente (dando $P = 1$):

$$n_{i,j} - n_{i,j}^0 = -\frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left[J_{i,j}^E - J_{i,j}^W \right] - \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} \frac{\Delta t}{\Delta z_j} \left[J_{i,j}^N - J_{i,j}^S \right], \quad (5.51)$$

donde

$$J_{i,j}^E = \frac{1}{2} \left(a_{i,j} \mathcal{V}_E n_{i+1,j} + b_{i,j} \mathcal{V}_E n_{i,j} \right), \quad (5.52)$$

$$J_{i,j}^W = \frac{1}{2} \left(c_{i,j} \mathcal{V}_W n_{i,j} + d_{i,j} \mathcal{V}_W n_{i-1,j} \right), \quad (5.53)$$

$$J_{i,j}^N = \frac{1}{2} \left(e_{i,j} \mathcal{V}_N n_{i,j+1} + f_{i,j} \mathcal{V}_N n_{i,j} \right), \quad (5.54)$$

$$J_{i,j}^S = \frac{1}{2} \left(g_{i,j} \mathcal{V}_S n_{i,j} + h_{i,j} \mathcal{V}_S n_{i,j-1} \right), \quad (5.55)$$

junto con las *velocidades*

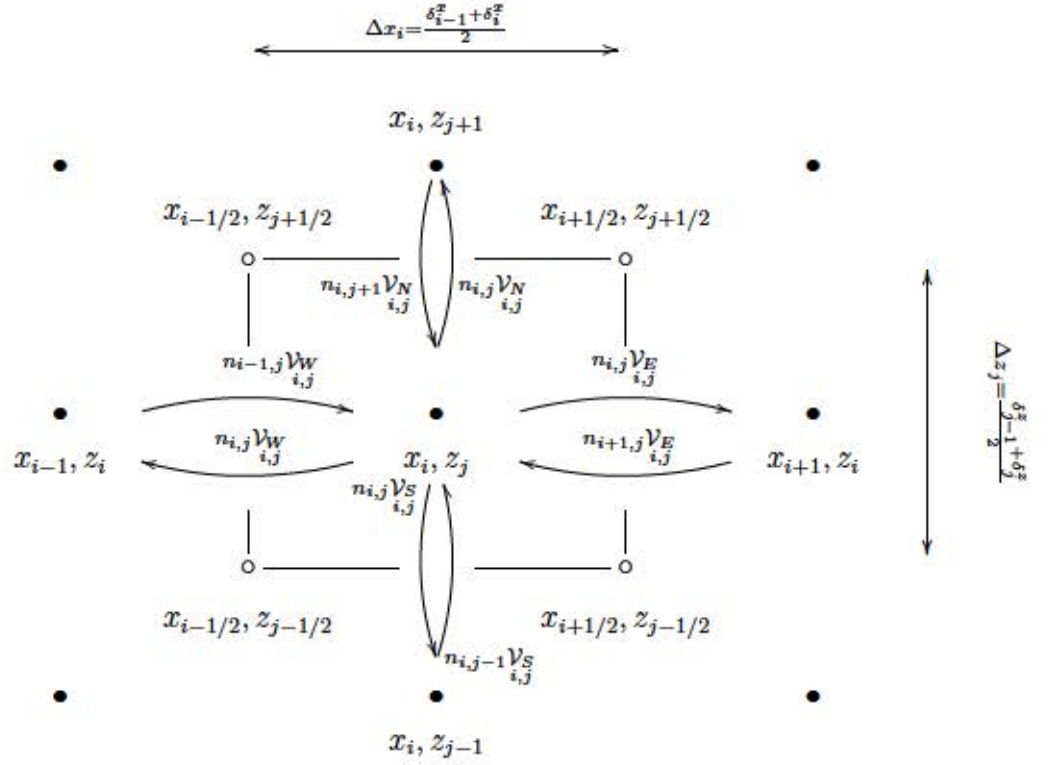
$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{E_{i,j}} &= 2 \frac{\frac{\Omega_{i+1,j} - \Omega_{i,j}}{\delta x_i}}{1 + \left(\frac{\Omega_{i+1,j} - \Omega_{i,j}}{\delta x_i} \right)^2}, \\ \mathcal{V}_{W_{i,j}} &= 2 \frac{\frac{\Omega_{i,j} - \Omega_{i-1,j}}{\delta x_{i-1}}}{1 + \left(\frac{\Omega_{i,j} - \Omega_{i-1,j}}{\delta x_{i-1}} \right)^2}, \\ \mathcal{V}_{N_{i,j}} &= \frac{\Omega_{i,j+1} - \Omega_{i,j}}{\delta z_j}, \\ \mathcal{V}_{S_{i,j}} &= \frac{\Omega_{i,j} - \Omega_{i,j-1}}{\delta z_{j-1}} \end{aligned}$$

y en el que las funciones a, b, c, d, e, f, g, h activarán la parte del flujo según el signo de la componente de la velocidad:

$$\begin{aligned} a_{i,j} &= 1 - \text{sign } \mathcal{V}_{E_{i,j}}, b_{i,j} = 1 + \text{sign } \mathcal{V}_{E_{i,j}}, c_{i,j} = 1 - \text{sign } \mathcal{V}_{W_{i,j}}, d_{i,j} = 1 + \text{sign } \mathcal{V}_{W_{i,j}}, \\ e_{i,j} &= 1 - \text{sign } \mathcal{V}_{N_{i,j}}, f_{i,j} = 1 + \text{sign } \mathcal{V}_{N_{i,j}}, g_{i,j} = 1 - \text{sign } \mathcal{V}_{S_{i,j}}, h_{i,j} = 1 + \text{sign } \mathcal{V}_{S_{i,j}}, \end{aligned} \quad (5.56)$$

(notar que el factor $1/2$ que debería ir en la definición de las funciones a, b, c, d, e, f, g, h está en las ecuaciones (5.52)-(5.55)) con $2 \leq i \leq N_x - 1$, $2 \leq j \leq N_z - 1$.

El siguiente diagrama 2.1 da una idea gráfica de cómo se activan los flujos según el signo de cada componente de la velocidad, donde el punto central dentro de la celda $\mathcal{C}_{i,j}$ denota el nodo (x_i, z_j) :



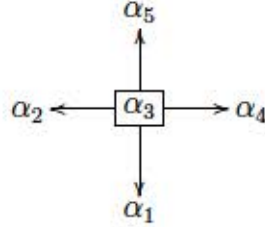
Sustituyendo (5.52)-(5.55) en (5.51) obtenemos

$$\begin{aligned}
 n_{i,j} = & n_{i,j}^0 - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left[(a_{i,j} n_{i+1,j} + b_{i,j} n_{i,j}) \cdot \mathcal{V}_{E_{i,j}} \right. \\
 & \left. - (c_{i,j} n_{i,j} + d_{i,j} n_{i-1,j}) \cdot \mathcal{V}_{W_{i,j}} \right] \\
 & - \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} \frac{\Delta t}{2\Delta z} \left[(e_{i,j} n_{i,j+1} + f_{i,j} n_{i,j}) \cdot \mathcal{V}_{N_{i,j}} \right. \\
 & \left. - (g_{i,j} n_{i,j} + h_{i,j} n_{i,j-1}) \cdot \mathcal{V}_{S_{i,j}} \right] . \quad (5.57)
 \end{aligned}$$

con $2 \leq i \leq N_x - 1$, $2 \leq j \leq N_z - 1$. Reordenando obtenemos

$$\alpha_1 n_{i,j-1} + \alpha_2 n_{i-1,j} + \alpha_3 n_{i,j} + \alpha_4 n_{i+1,j} + \alpha_5 n_{i,j+1} = n_{i,j}^0 \quad (5.58)$$

donde los valores de los coeficientes de la molécula



son

$$\begin{aligned}
 \alpha_{1,i,j} &= -a_1 \frac{\Delta t}{2\Delta z_j} h_{i,j} \mathcal{V}_S, \\
 \alpha_{2,i,j} &= -\frac{\Delta t}{2\Delta x_i} d_{i,j} \mathcal{V}_W, \\
 \alpha_{3,i,j} &= 1 + \frac{\Delta t}{2\Delta x_i} \left(b_{i,j} \mathcal{V}_E - c_{i,j} \mathcal{V}_W \right) + \frac{a_1 \Delta t}{2\Delta z_j} \left(f_{i,j} \mathcal{V}_N - g_{i,j} \mathcal{V}_S \right), \\
 \alpha_{4,i,j} &= \frac{\Delta t}{2\Delta x_i} a_{i,j} \mathcal{V}_E, \\
 \alpha_{5,i,j} &= \frac{a_1 \Delta t}{2\Delta z_j} e_{i,j} \mathcal{V}_N
 \end{aligned}$$

$$\text{con } a_1 = \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]}.$$

Nótese que en caso de haberse implementado el primer orden de las correcciones de los flujos ((4.78), (4.83)), no hubiera hecho falta que el algoritmo identificara el signo de la velocidad ya que volveríamos a tener un problema de tipo convectivo-difusivo.

5.2.4.1 Condiciones de contorno en la ecuación de transporte

Veamos primero las condiciones en los contactos. En cuanto a los flujos en la dirección z , si aplicamos el operador diferencial ∂_z sobre las condiciones Dirichlet (5.44),(5.45) de la ecuación de Poisson obtendremos la velocidad *analítica* en los contactos $x = 0, N$. Estos valores corresponderán a los \mathcal{V}_S , \mathcal{V}_N , \mathcal{V}_S y \mathcal{V}_N del esquema numérico.

\mathcal{V}_N , \mathcal{V}_S y \mathcal{V}_N del esquema numérico.

En cuanto a la condición en el colector, adaptamos la implementación vista en el caso unidimensional, relación (5.21), con lo que a la velocidad en la interfase *este* de la última celda le asignamos el valor de la *oeste* de la

misma celda, i.e., $\mathcal{V}_{E_{N_x,j}} \leftrightarrow \mathcal{V}_{W_{N_x,j}}$, con lo que

$$J_{N_x,j}^E = \mathcal{V}_{W_{N_x,j}} n_{N_x,j}. \quad (5.59)$$

Utilizaremos esta implementación para cualquier signo de la velocidad $\mathcal{V}_{E_{N_x,j}}$, ya que la condición óhmica del contacto colector (5.42) da inestabilidades numéricas.

Para la condición inyectora si $\mathcal{V}_{W_{1,j}} > 0$ consideraremos la versión numérica de la ecuación óhmica (5.41), esto es

$$J_{1,j}^W = \sigma (\partial_x \Omega_{1,j} - \beta z_j \sin \theta \cos \theta), \quad \mathcal{V}_{W_{1,j}} > 0 \quad (5.60)$$

y si $\mathcal{V}_{W_{1,j}} < 0$ entonces adaptamos la implementación análoga vista en el colector, i.e. $\mathcal{V}_{W_{1,j}} \leftrightarrow \mathcal{V}_{E_{1,j}}$, con lo que

$$J_{1,j}^W = \mathcal{V}_{E_{1,j}} n_{1,j}, \quad \mathcal{V}_{W_{1,j}} < 0. \quad (5.61)$$

La condición en los bordes aislados de la ecuación de Poisson (5.46) nos da la velocidad \mathcal{V}_z en $z = -1/2$ y $z = 1/2$, con lo que dicha velocidad es $\mathcal{V}_{S_{i,1}} > 0$ y $\mathcal{V}_{N_{i,N_z}} < 0$ respectivamente $\forall t$. Las condiciones de contorno en los bordes aislados para la ecuación de transporte serán la implementación numérica de $J_{nz}(x, \pm 1/2, t) = 0$, incluidas las esquinas $(1, \pm 1/2)$, $(N, \pm 1/2)$. A partir de estas condiciones de contorno tenemos la ecuación discretizada que involucra la densidad electrónica n para el cátodo siguiente

$$\begin{aligned} n_{1,j} - n_{1,j}^0 &= -\frac{\Delta t}{\Delta x} \left[J_{1,j}^E - \frac{r^+}{2} \sigma (\partial_x \Omega_{1,j} - \beta \sin \theta \cos \theta z) - \frac{r^-}{2} \mathcal{V}_{E_{1,j}} n_{1,j} \right] \\ &\quad - \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[J_{1,j}^N - J_{1,j}^S \right], \end{aligned} \quad (5.62)$$

donde $r^\pm = 1 \pm \text{sign}(\partial_x \Omega_{1,j})$ activará la parte del flujo numérico según las discriminaciones anteriores (5.60), (5.61) y donde para calcular la aproximación $\partial_x \Omega_{1,j}$ utilizaremos una diferencia finita descentrada [52]. Para el ánodo tendremos entonces

$$n_{N_x,j} - n_{N_x,j}^0 = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\mathcal{V}_{W_{N_x,j}} n_{N_x,j} - J_{N_x,j}^W \right] - \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[J_{N_x,j}^N - J_{N_x,j}^S \right]. \quad (5.63)$$

En los bordes aislados tenemos que $J_{nz}(z = \pm 1/2) = 0$, con lo que numéricamente $J_{nz}^S = 0$ y $J_{nz}^N = 0$. Por lo tanto

$$n_{i,1} - n_{i,1}^0 = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \left[J_{i,1}^E - J_{i,1}^W \right] - \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} \frac{\Delta t}{\Delta z} J_{i,1}^N, \quad (5.64)$$

$$n_{i,N_z} - n_{i,N_z}^0 = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \left[J_{i,N_z}^E - J_{i,N_z}^W \right] - \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} \frac{\Delta t}{\Delta z} J_{i,N_z}^S. \quad (5.65)$$

Reordenando la ecuación (5.62) obtenemos para el contacto inyector

$$\alpha_j^{INY} n_{1,j-1} + \alpha_j^{INY} n_{1,j} + \alpha_j^{INY} n_{2,j} + \alpha_j^{INY} n_{1,j+1} = n_{1,j}^0 + \alpha_j^{INY,TF}$$

donde

$$\begin{aligned} \alpha_j^{INY} &= -\frac{a_1 \Delta t}{2 \Delta z_j} h_{1,j} \mathcal{V}_j^{INY}, \\ \alpha_j^{INY} &= \frac{\Delta t}{2 \Delta x_1} r^+ \sigma \left(\partial_x \Omega_{1,j} - \beta \sin \theta \cos \theta z_j \right), \\ \alpha_j^{INY} &= 1 + \frac{\Delta t}{2 \Delta x_1} \left(b_{1,j} \mathcal{V}_{1,j}^E - r^- \mathcal{V}_{1,j}^E \right) \\ &\quad + \frac{a_1 \Delta t}{2 \Delta z_j} \left(f_{1,j} \mathcal{V}_j^{INY} - g_{1,j} \mathcal{V}_j^{INY} \right), \\ \alpha_j^{INY} &= \frac{\Delta t}{2 \Delta x_1} a_{1,j} \mathcal{V}_{1,j}^E, \\ \alpha_j^{INY} &= \frac{a_1 \Delta t}{2 \Delta z_j} e_{1,j} \mathcal{V}_j^{INY} \end{aligned}$$

con $2 \leq j \leq N_z - 1$ y donde en $j = 1, N_z$ consideraremos $\mathcal{V}_1^{INY} = 0 = \mathcal{V}_{N_z}^{INY}$.

Los superíndices INY , TF denotan *inyector* (i.e., aquellos nodos (i, j) tales que $i = 1$) y *término fuente* respectivamente. Nótese que las velocidades obtenidas analíticamente a partir de las condiciones Dirichlet en el borde inyector de la ecuación de Poisson las hemos denotado con el superíndice INY . Análogamente también lo denotaremos para las velocidades analíticas en el colector.

De (5.63) obtenemos para el contacto colector que

$$\alpha_j^{COL} n_{N_z,j-1} + \alpha_j^{COL} n_{N_z-1,j} + \alpha_j^{COL} n_{N_z,j} + \alpha_j^{COL} n_{N_z,j+1} = n_{N_z,j}^0 \quad (5.66)$$

(nótese que no hay término α_4) donde

$$\begin{aligned}\alpha_1^{COL} &= -\frac{a_1 \Delta t}{2 \Delta z_j} h_{N_x, j} \mathcal{V}_j^{COL}, \\ \alpha_2^{COL} &= -\frac{\Delta t}{2 \Delta x_{N_x}} d_{N_x, j} \mathcal{V}_{N_x, j}^W, \\ \alpha_3^{COL} &= 1 + \frac{\Delta t}{2 \Delta x_1} \left(\mathcal{V}_{N_x, j}^W - c_{N_x, j} \mathcal{V}_{N_x, j}^W \right) \\ &\quad + \frac{a_1 \Delta t}{2 \Delta z_j} \left(f_{N_x, j} \mathcal{V}_j^{COL} - g_{N_x, j} \mathcal{V}_j^{COL} \right), \\ \alpha_5^{COL} &= \frac{a_1 \Delta t}{2 \Delta z_j} e_{N_x, j} \mathcal{V}_j^{INY}\end{aligned}$$

con $2 \leq j \leq N_z - 1$ y donde en $j = 1, N_z$ consideramos $\mathcal{V}_1^{COL} = 0 = \mathcal{V}_{N_z}^{COL}$.

5.2.4.2 Construcción matricial del método

El objetivo de reformular las ecuaciones utilizando las variables α_p , $1 \leq p \leq 5$, es la simplificación en su implementación en la matriz A de la ecuación matricial $An = b(n^0)$ para resolver numéricamente la ecuación de transporte.

Sean las tres siguientes matrices de orden $N_x \times N_x$:

$$D_j = \begin{pmatrix} \alpha_3^{INY} & \alpha_4^{INY} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha_{2,j} & \alpha_{3,j} & \alpha_{4,j} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \alpha_{2,N_x-1,j} & \alpha_{3,N_x-1,j} & \alpha_{4,N_x-1,j} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \alpha_{2,j}^{COL} & \alpha_{3,j}^{COL} \end{pmatrix},$$

$$B_j = \begin{pmatrix} \alpha_j^{INY} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_{2j} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \alpha_{N_x-1,j} & 0 \\ 0 & \dots & & 0 & \alpha_j^{COL} \end{pmatrix},$$

$$C_j = \begin{pmatrix} \alpha_j^{INY} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_{2j} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \alpha_{N_x-1,j} & 0 \\ 0 & \dots & & 0 & \alpha_j^{COL} \end{pmatrix}.$$

La matriz de coeficientes pentadiagonal A de la ecuación matricial $An = b$ para resolver la ecuación de transporte mediante el *upwind differencing* FVM implícito queda:

$$A = \begin{pmatrix} D_1 & C_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ B_2 & D_2 & C_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & B_{N_x-1} & D_{N_x-1} & C_{N_x-1} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & B_{N_x} & C_{N_x} \end{pmatrix},$$

Los vectores columna de incógnitas y del término fuente son respectivamente:

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_{1,1} \\ n_{2,1} \\ \vdots \\ n_{N_x-1,1} \\ n_{N_x,1} \\ \hline \vdots \\ \hline n_{1,j} \\ n_{2,j} \\ \vdots \\ n_{N_x-1,j} \\ n_{N_x,j} \\ \hline \vdots \\ \hline n_{1,N_z} \\ n_{2,N_z} \\ \vdots \\ n_{N_x-1,N_z} \\ n_{N_x,N_z} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} n_{1,1}^0 - \alpha_1^{INY} \\ n_{2,1}^0 \\ \vdots \\ n_{N_x-1,1}^0 \\ n_{N_x,1}^0 \\ \hline \vdots \\ \hline n_{1,j}^0 - \alpha_j^{INY} \\ n_{2,j}^0 \\ \vdots \\ n_{N_x-1,j}^0 \\ n_{N_x,j}^0 \\ \hline \vdots \\ \hline n_{1,N_z}^0 - \alpha_{N_z}^{INY} \\ n_{2,N_z}^0 \\ \vdots \\ n_{N_x-1,N_z}^0 \\ n_{N_x,N_z}^0 \end{pmatrix}.$$

n	Ω	v_x	v_z	x, k^{-1}
$N_D + \frac{\varepsilon B^2}{m}$	$\frac{\hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}}{e}$	$\frac{\Delta I_1}{4\hbar I_0 \sqrt{1 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}}$	$\frac{\hbar \sqrt{1 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}}{m L_z}$	l
$38.0018 \times \frac{10^{22}}{\text{m}^3}$	$l \times 3.5507 \frac{\text{kV}}{\text{cm}}$	$17.7125 \frac{\text{km}}{\text{s}}$	$0.2865 \frac{\text{km}}{\text{s}}$	8.3 nm

z, k_z^{-1}	t
L_z	$\frac{[x]}{[v_x]}$
$20 \mu\text{m}$	0.4686 ps

masa en reposo del electrón	m_e	$0.91095 \times 10^{-30} \text{ [kg]}$
masa del electrón	m	$6.1034 \times 10^{-32} \text{ [kg]}$
constante dieléctrica	ε	$1.1068 \times 10^{-10} \text{ [C}^2/(\text{Nm}^2)\text{]}$
densidad del dopaje	N_D	$3e22 \text{ [m}^{-3}\text{]}$
intensidad del campo magnético	B	$0 \leq B \leq 14 \text{ [T]}$
carga del electrón	e	$1.60218 \times 10^{-19} \text{ [C]}$
frecuencia de choque inelásticos	ν_e	$(1e12)/1.5 \text{ [Hz]} (B = 14T, \theta = \pi/2),$ $1.35e12 \text{ [Hz]} (0.1T \leq B < 2T, 0 \leq \theta < \pi/2)$ $0.9e12 \text{ [Hz]} (B \geq 2T, 0 \leq \theta < \pi/2)$
frecuencia de choque elásticos	ν_p	$(1e15)/21 \text{ [Hz]} (B = 14T, \theta = \pi/2),$ $1.35e13 \text{ [Hz]} (0.1T \leq B < 2T, 0 \leq \theta < \pi/2)$ $0.9e13 \text{ [Hz]} (B \geq 2T, 0 \leq \theta < \pi/2)$
constante reducida de Planck	\hbar	$1.05457 \times 10^{-34} \text{ [Js]}$
longitud del período	l	$8.3 \times 10^{-9} \text{ [m]}$
energía de la minibanda	Δ	$3.04413528 \times 10^{-21} \text{ [J]} = 19 \text{ [meV]}$
número de pozos	N	14
temperatura de la red	T	4.2 [K]
longitud del dispositivo en la dirección z	L_z	$20 \times 10^{-6} \text{ [m]}$
voltaje aplicado	V	parámetro libre [V]
conductividad eléctrica del material	σ	parámetro libre $[(\text{Ohm} \times \text{m})^{-1}]$
ángulo entre B y el eje x	θ	$0 \leq \theta \leq \pi/2$

Tabla 5.1: Arriba: escalamiento de las ecuaciones diferenciales para $B = 2T$. Abajo: parámetros físicos del modelo donde $\tau_e = \sqrt{1 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}$.

Capítulo 6

Resultados numéricos

Los resultados presentados en este capítulo abarcan experimentos numéricos de distintas intensidades magnéticas a distintos ángulos entre el campo magnético y el eje de crecimiento de la superred, donde se han encontrado inestabilidades del tipo Gunn.

Las simulaciones sin campo magnético muestran un comportamiento unidimensional de la densidad y de la componente x del campo eléctrico similar al caso cuando el campo magnético es perpendicular al eje de crecimiento de los pozos visto a lo largo de la sección (5.1). La figura 6.1 muestra un reciclaje completo de la densidad electrónica sin presencia de campo magnético. Calcularemos la corriente I mediante la integración de la densidad de corriente $\underline{J}_n = (J_{nx}, J_{nz})$ sobre la sección del colector. Con dimensiones

$$I(t) = \int_{col} (J_{nx}, J_{nz}) \cdot \underline{N} dA_{col}, \quad (6.1)$$

donde \underline{N} es la normal que apunta hacia afuera de la muestra y A_{col} es la superficie del colector. Tomamos las dimensiones de la corriente como

$$[I] = [n][v_x]eL_zL_y = 0.034 \text{ C/s}.$$

En la figura 6.2 se muestra el perfil de la corriente $I/[I]$ para campo magnético nulo.

Para campos magnéticos paralelos al eje x , i.e. $\theta = 0$, las simulaciones para la densidad electrónica muestran una simetría respecto de la recta $z = 0$ debido al desacoplamiento de las frecuencias de Bloch, $\omega_B = \frac{eFl}{\hbar}$, y las frecuencias ciclotrónicas, $\omega_c = \frac{eB}{m} \cos \theta$, provenientes del campo magnético. Para explicar este fenómeno consideramos las ecuaciones semiclásicas con dimensiones de (2.3). Supongamos que no hay colisiones entre electrones y que el

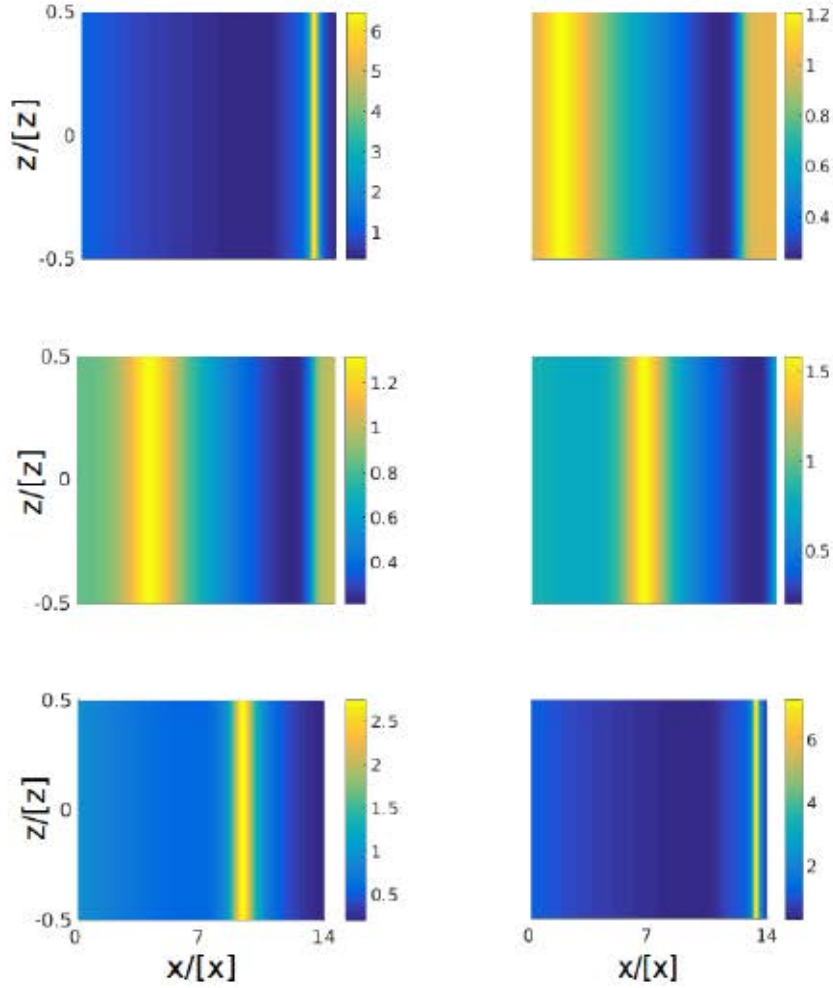


Figura 6.1: $B = 0\text{T}$, $V = 0.12\text{V}$. Secuencia de reciclaje de la densidad electrónica n para una oscilación completa de la corriente. Los tiempos de la secuencia son $t/[t] = 255, 260, 265, 270, 275, 280$, que corresponden a los del perfil de la corriente $I(t)$ de la figura 6.2. Notar que las escalas de las figuras son diferentes.

campo eléctrico es constante para todo tiempo t . Si consideramos un campo eléctrico $\underline{F} = (F, F_y, F_z)$, un campo magnético $\underline{B} = (B \cos \theta, 0, B \sin \theta)$ con inclinación θ sobre el eje x y además suponemos que el potencial eléctrico es independiente de y , entonces obtenemos para las órbitas del electrón las

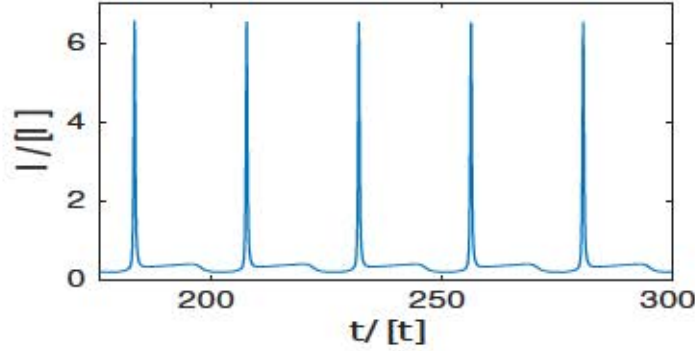


Figura 6.2: $B = 0\text{T}$, $V = 0.12\text{V}$. Perfil de la corriente $I(t)$. De los tiempos $t/[t] = \{255, 260, 265, 270, 275, 280\}$ se han obtenido las secuencias para la densidad electrónica de la figura 6.1.

siguientes ecuaciones:

$$\dot{x} = \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin kl, \quad (6.2)$$

$$\dot{z} = \frac{\hbar}{m} k_z, \quad (6.3)$$

$$\hbar \dot{k} = eF - \frac{eB}{m} \hbar k_y \sin \theta, \quad (6.4)$$

$$\hbar \dot{k}_z = eF_z + \frac{eB}{m} \hbar k_y \cos \theta \quad (6.5)$$

con k_y dado por la ecuación

$$k_y = \frac{eB}{\hbar} (x \sin \theta - z \cos \theta).$$

Tal como se calculó en (2.3), si consideramos $\theta = 0^\circ$ en las ecuaciones (6.2)-(6.6) se llega a que la componente x del movimiento del electrón depende únicamente de la frecuencia ω_B y que la componente z solo depende de la frecuencia ciclotrónica ω_c . Por lo tanto, cuando el campo magnético sigue la dirección del eje x la frecuencia de Bloch está desacoplada de la frecuencia ciclotrónica.

Siguiendo el mismo desarrollo para el caso de un campo magnético con una inclinación $0 < \theta < \pi/2$ se llega a la ecuación del oscilador armónico forzado:

$$\ddot{k}_z + \omega_c^2 k_z = \frac{e^2 B^2 \Delta l}{4m\hbar^2} \sin 2\theta \sin \left\{ \left(\omega_B + \frac{eF_z l}{\hbar} \tan \theta \right) t - l(k_z - k_{z0}) \tan \theta + lk_0 \right\}, \quad (6.6)$$

con lo que la órbita del electrón se modificará debido al acoplamiento entre la frecuencia natural ω_c y la frecuencia *conductora* $\omega_B + \frac{eF_z l}{\hbar} \tan \theta$ del oscilador.

Existen dos dinámicas electrónicas bidimensionales según las intensidades magnéticas. Si la magnitud del campo magnético está por encima de una intensidad crítica $B_c \approx 2\text{T}$, existirá un confinamiento electrónico por el cual se formará un canal de densidad de carga estrecho entre los contactos donde la inclinación dependerá del ángulo del campo magnético y la anchura máxima de su intensidad. Dicha anchura será una pequeña fracción del dominio. Fuera del canal, la densidad electrónica caerá a valores muy cercanos a cero, por lo que no habrá dinámica electrónica en esa región. Por lo tanto consideraremos campos magnéticos bajos aquellos campos B tales que su magnitud esté por debajo B_c .

6.1 Campos magnéticos bajos

En la figura 6.3 se muestra una onda viajera de densidad electrónica bajo la acción de un campo magnético de magnitud $B = 0.1\text{T}$ con ángulo $\theta = 0^\circ$ y voltaje $V = 0.12\text{V}$ donde se observa dos ramas estáticas que la encierran durante todo el reciclaje. Una secuencia completa del reciclaje para la densidad electrónica se muestra en 6.4 donde por claridad de aquí en adelante se ha optado por representar solo la región dentro de las ramas. El perfil correspondiente de la corriente para los parámetros mencionados se ilustra en la figura 6.5.

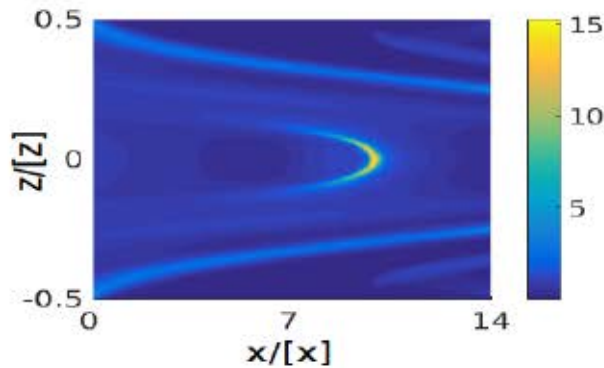


Figura 6.3: $B = 0.1\text{T}$, $V = 0.12\text{V}$. Onda en la densidad electrónica encerrada por dos ramas estáticas.

En la figura 6.6 se muestra, para un ángulo $\theta = 60^\circ$ con $B = 0.1\text{T}$ y

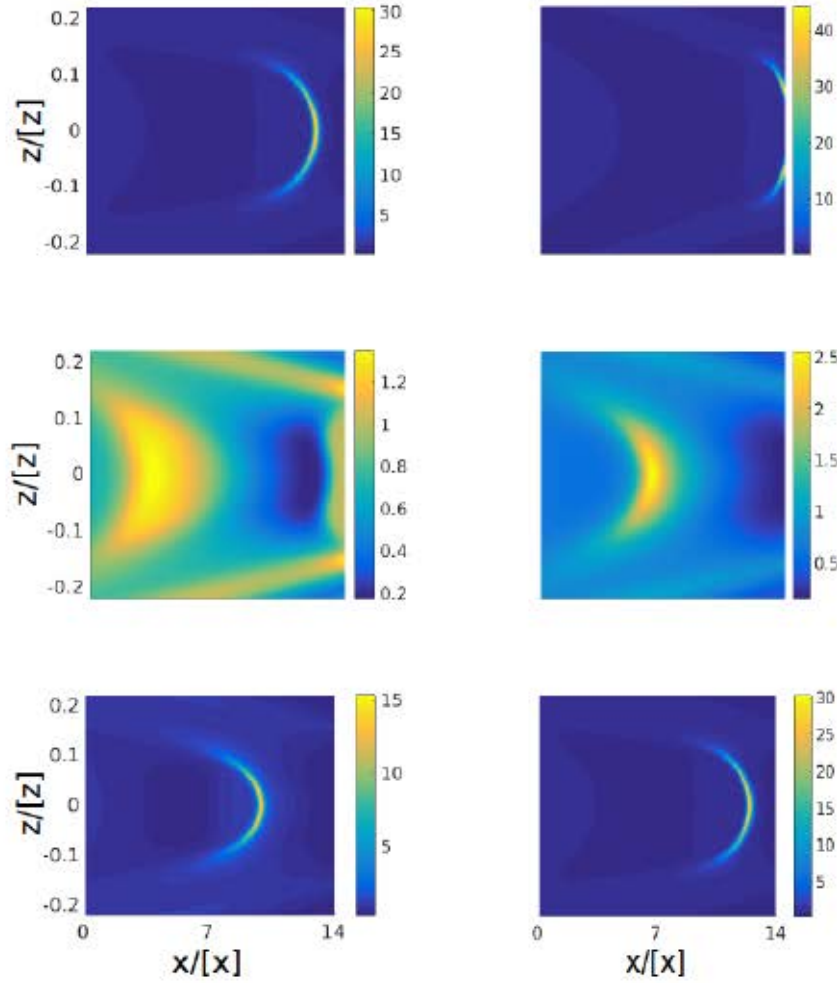


Figura 6.4: $B = 0.1\text{T}$, $V = 0.12\text{V}$, $\theta = 0^\circ$. Secuencia de reciclaje de la densidad electrónica n para una oscilación completa de la corriente. Los tiempos de la secuencia son $t/[t] = 710, 715, 720, 725, 730, 735$, que corresponden a los del perfil de la corriente $I(t)$ de la figura 6.5. Notar que no se muestra todo el dominio en el eje z y que las escalas son diferentes en cada secuencia.

$V = 0.14\text{V}$, el efecto que produce la inclinación del campo magnético sobre la onda de densidad electrónica (igual que antes, las figuras muestran solo la región encerrada por las ramas para una mayor claridad). Además, para este caso el perfil de la corriente tiene un periodo más largo, tal como se observa en la figura 6.7. En la figura 6.8 se muestra un reciclaje completo de la densidad electrónica y el perfil de la corriente para los valores de $B = 1\text{T}$, $V = 0.3\text{V}$ con un ángulo de $\theta = 85^\circ$.

La banda de frecuencias de las oscilaciones de la corriente $I(t)$ se en-

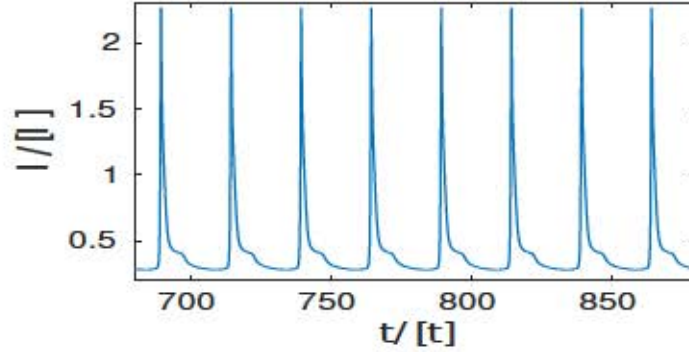


Figura 6.5: $B = 0.1\text{T}$, $V = 0.12\text{V}$, $\theta = 0^\circ$. Perfil de la corriente $I(t)$. De los tiempos $t/[t] = \{710, 715, 720, 725, 730, 735\}$ se han obtenido las secuencias para la densidad electrónica de la figura 6.4.

cuentra en el orden de los subterahercios. En la parte de la derecha de la figura 6.10 se muestra la característica corriente-voltaje $I(V)$ para los casos $\theta = 0^\circ$, 30° y 60° , donde también se indican los máximos y los mínimos de las oscilaciones de la corriente. En la izquierda se encuentran las correspondientes frecuencias para los distintos voltajes. En la anterior figura, los experimentos numéricos son para una misma intensidad del campo magnético, $B = 0.1\text{T}$. En la característica $I(V)$ se aprecia el carácter óhmico hasta un voltaje crítico similar en los tres casos $\theta = 0^\circ$, 30° , 60° que es aproximadamente $V_c \approx 0.03\text{V}$. En la figura 6.11 los parámetros son $B = 1\text{T}$ y $\theta = 85^\circ$. En los experimentos numéricos también se observa que al aumentar la intensidad del campo magnético y mantener los demás parámetros fijos, la frecuencia aumenta. En concreto, para un voltaje $V = 0.3\text{V}$ y una inclinación del campo magnético $\theta = 85^\circ$, si variamos la intensidad magnética B de 0T a 1T la frecuencia aumenta aproximadamente de 46GHz a 85GHz , mientras que la amplitud de las oscilaciones de la corriente $I(t)$ disminuyen, tal como muestra la figura 6.11. En concreto, los máximos de las amplitudes de la corriente disminuyen de 59.5 mA para $B = 0.125\text{T}$ a 27.5 mA para $B = 1\text{T}$, mientras que los mínimos aumentan de 5 mA a 13 mA .

6.2 Campos magnéticos altos

A partir de campos mayores o iguales a 2T la densidad electrónica se confina en un canal. Para este tipo de régimen las tasas de colisión tanto en la superred como en el contacto inyector son distintas respecto del caso de las intensidades magnéticas bajas.

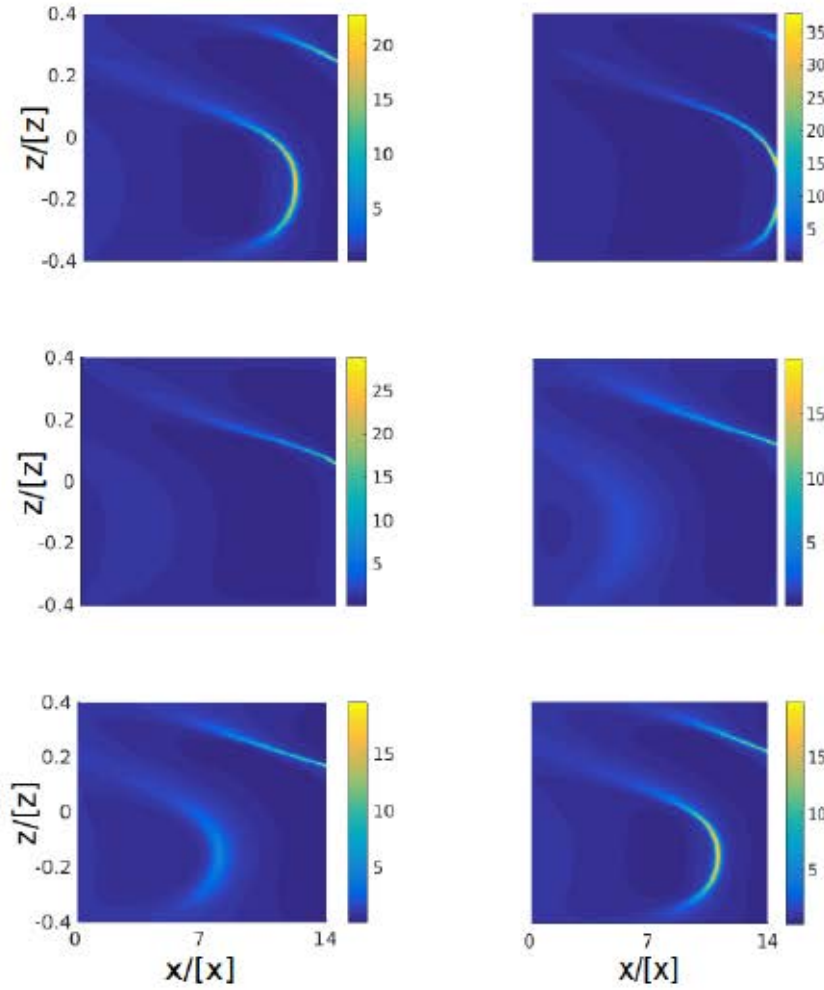


Figura 6.6: $B = 0.1\text{T}$, $V = 0.12\text{V}$, $\theta = 60^\circ$. Secuencia de reciclaje de la densidad electrónica n para una oscilación completa de la corriente. Los tiempos de la secuencia son $t/[t] = 1520, 1525, 1530, 1535, 1540, 1545$, que corresponden a los del perfil de la corriente $I(t)$ de la figura 6.7. Notar que no se muestra todo el dominio en el eje z y que las escalas son diferentes en cada secuencia.

6.2.1 Tasas de colisión

En los cálculos realizados en el artículo [21] se muestra una dependencia entre la intensidad magnética B y la frecuencia de *scattering* inelástica en la que si la intensidad magnética aumenta, la frecuencia de colisión inelástica disminuye. En particular, para una superred igual a la estudiada en esta tesis, dicho trabajo muestra que las frecuencias de los choques inelásticos se mantienen constantes hasta intensidades de diez teslas para luego disminuir aproximadamente en un factor diez para intensidades de más de veinte tes-

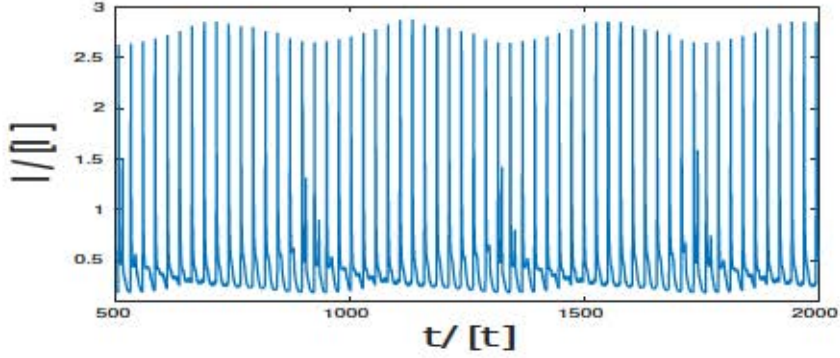


Figura 6.7: $B = 0.1\text{T}$, $V = 0.12\text{V}$, $\theta = 60^\circ$. Perfil de la corriente $I(t)$. De los tiempos $t/[t] = \{1520, 1525, 1530, 1535, 1540, 1545\}$ se han obtenido las secuencias para la densidad electrónica de la figura 6.6.

las. En los experimentos numéricos realizados en este capítulo, la frecuencia inelástica utilizada en campos magnéticos bajos es de $\nu_e = 1.35e12\text{Hz}$, mientras que para intensidades de $B = 2\text{T}$ se ha reducido dicha frecuencia a $\nu_e = 9e11\text{Hz}$. Para estos valores numéricos de las frecuencias se han encontrado soluciones oscilatorias de la corriente.

Otro parámetro libre que ha variado significativamente de campos magnéticos bajos a altos es la conductividad σ . Mientras que valores adimensionales de $\sigma = 0.1$ permiten encontrar soluciones oscilatorias de la corriente para intensidades bajas, para intensidades altas se debe reducir dicho parámetro en tres órdenes de magnitud. A partir del modelo de Drude para la conducción eléctrica visto en (3.2.3) en donde se establece que

$$\sigma = \frac{e^2 \tau_c n_c}{m},$$

se puede calcular para qué tiempos de *scattering* en el contacto inyector, τ_c , corresponden los anteriores valores adimensionales de la conductividad. Tomando el valor del dopaje en el contacto $n_c = 10^{23}\text{m}^{-3}$ y teniendo en cuenta las dimensiones de la conductividad $[\sigma] = \frac{e^2 l^2 \Delta I_1[n]}{4\hbar^2 I_0(\nu_e + \nu_p)}$ (sección (A.6) del apéndice), los valores de *scattering* en el contacto pasan a ser de $\tau_c = 0.708\text{fs}$ para intensidades magnéticas por debajo de los dos teslas a $\tau_c = 0.005\text{fs}$ para intensidades altas.

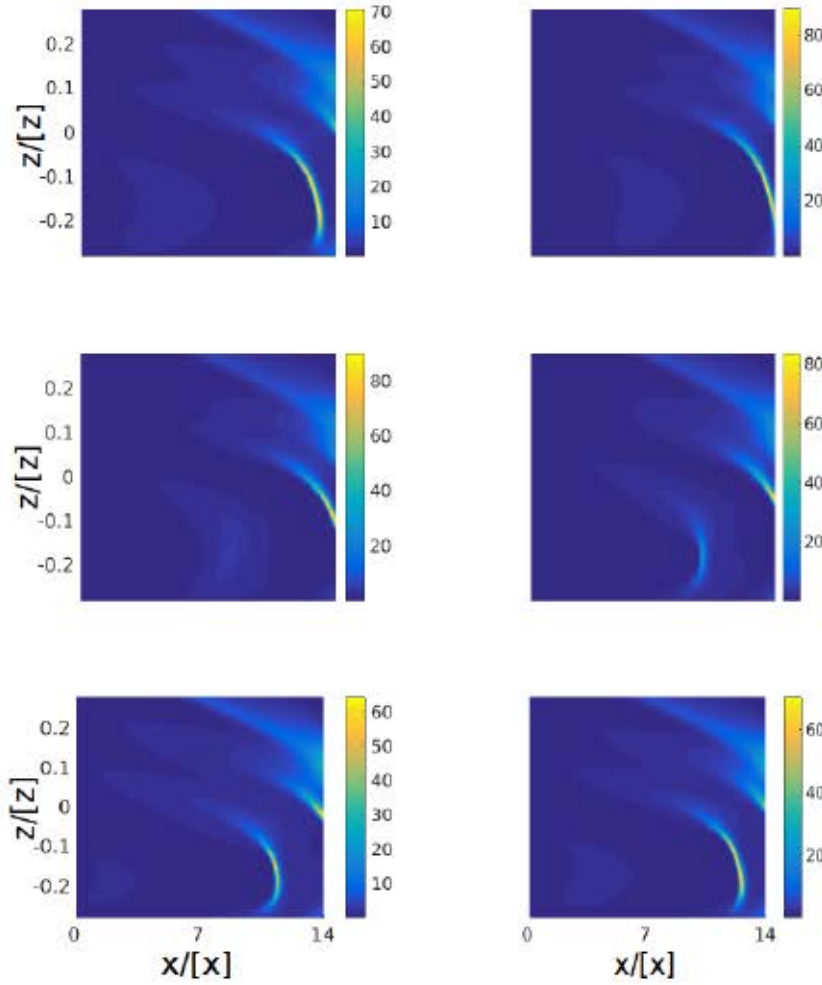


Figura 6.8: $B = 1\text{T}$, $V = 0.32\text{V}$, $\theta = 85^\circ$. Secuencia de reciclaje de la densidad electrónica n para una oscilación completa de la corriente. Los tiempos de la secuencia son $t/[t] = \{420, 425, 430, 435, 440, 445\}$, que corresponden a los del perfil de la corriente $I(t)$ de la figura 6.9. Notar que no se muestra todo el dominio en el eje z y que las escalas son diferentes en cada secuencia.

6.3 Oscilaciones estacionarias de la corriente

El valor numérico de las dimensiones de la corriente $[I]$ varía debido a que las escalas de la densidad electrónica $[n]$ y de la velocidad $[v_x]$ dependen de la intensidad magnética y de las tasas de colisión respectivamente. Para una intensidad $B = 2\text{T}$ y unas frecuencias $\nu_e = 9e11\text{Hz}$, $\nu_p = 9e12\text{Hz}$ se tiene que $[I] = 0.042\text{ C/s}$.

Se han encontrado oscilaciones estacionarias de la corriente para un rango

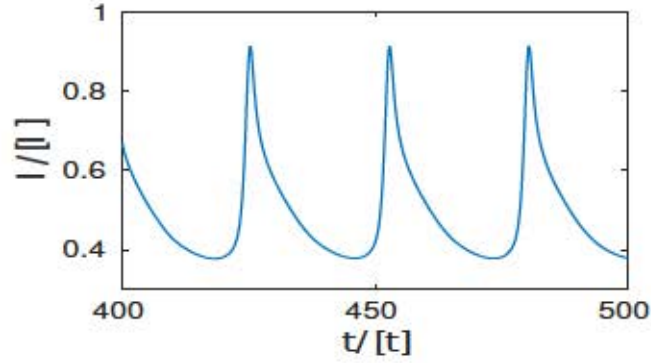


Figura 6.9: $B = 1\text{T}$, $V = 0.32\text{V}$, $\theta = 85^\circ$. Perfil de la corriente $I(t)$. De los tiempos $t[t] = 420, 425, 430, 435, 440, 445$ se han obtenido las secuencias para la densidad electrónica de la figura 6.8.

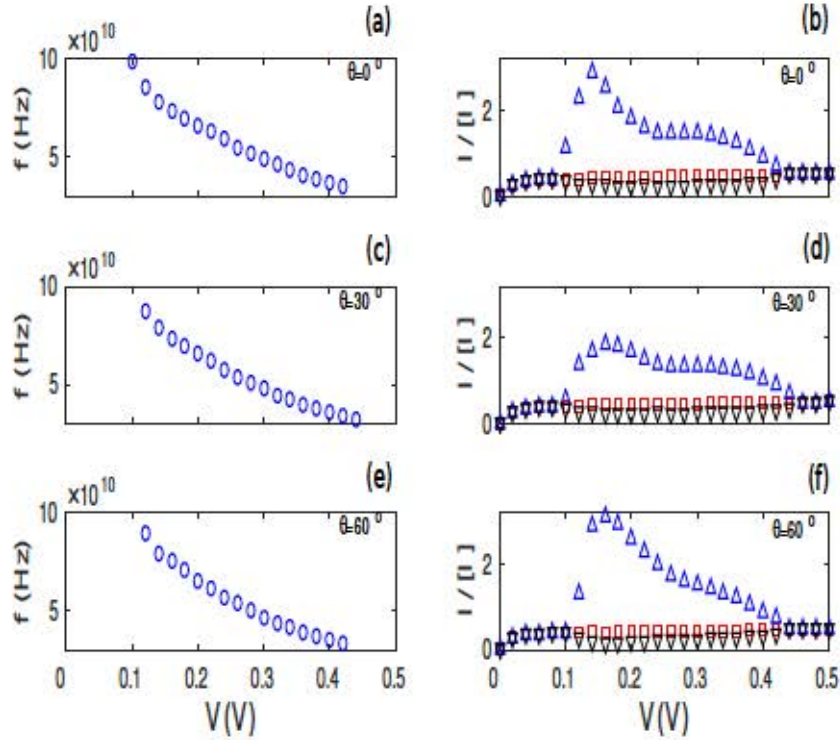


Figura 6.10: Frecuencias ((a), (c), (e)) y perfil $I(V)$ correspondiente ((b), (d), (f)) donde se muestran los máximos, promedios y los mínimos (símbolos Δ , \square , ∇ respectivamente) de las oscilaciones autosostenidas de $I(t)$ para cada voltaje donde hemos fijado $B = 0.1\text{T}$ con $\theta = 0^\circ, 30^\circ$ y 60° .

amplio de los parámetros. Por ejemplo, fijando los parámetros del campo

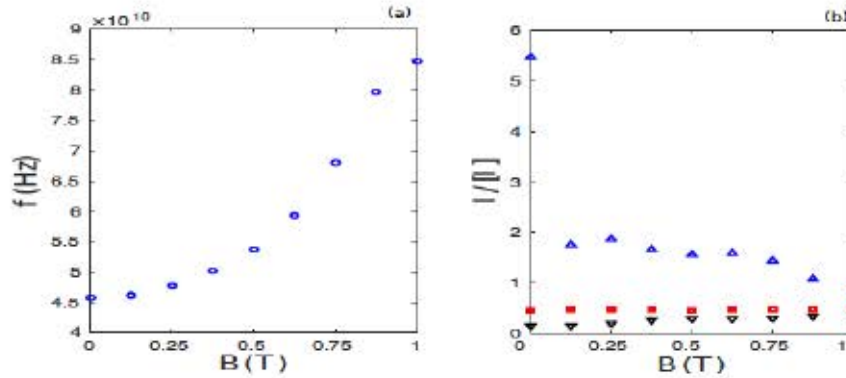


Figura 6.11: Frecuencias (a) de las oscilaciones de la corriente para un voltaje fijo de $V = 0.3V$ y $\theta = 85^\circ$ donde $0 \leq B \leq 1$. (b) Para estos mismos parámetros se muestra el perfil $I(B)$ con los máximos, promedios y mínimos (símbolos Δ , \square , ∇ respectivamente) de las oscilaciones autosostenidas de $I(t)$.

magnético a $B = 2T$ y $\theta = 15^\circ$ se encuentran dobles períodos en las oscilaciones de la corriente. Según se incrementa el voltaje, el doble período en la solución desaparece. Las soluciones con dobles períodos aparecen cerca del valor crítico del voltaje V_c , i.e., justo al final de la región óhmica en las curvas $I(V)$. En la figura 6.12 se muestra un perfil con doble período de la corriente para un valor del voltaje $V = 0.075V$.

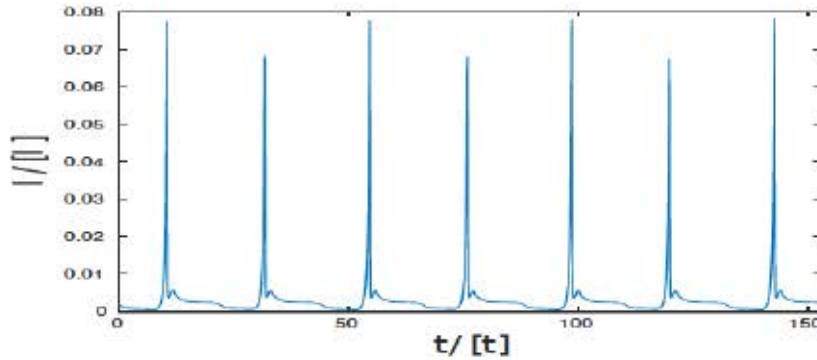


Figura 6.12: Doble período en las oscilaciones de la corriente para $B = 2T$, $\theta = 15^\circ$ y $V_c \approx V = 0.075V$.

Fijando los valores del ángulo y de la intensidad magnética a $\theta = 45^\circ$ y $B = 2T$ y dando valores al voltaje $V = \{0.085, 0.09, 0.095, 0.1\}V$ se obtienen las frecuencias y amplitudes de la corriente $f = \{84, 80, 77, 75\}GHz$ y $I_a = \{1.7, 3.8, 5.9, 8.5\}mA$ respectivamente. En la figura 6.13 se muestran varias oscilaciones de la corriente para el caso $V = 0.09V$.

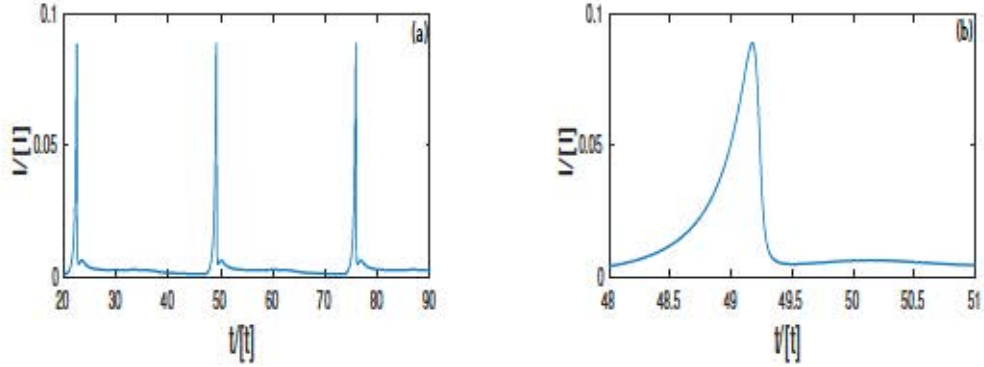


Figura 6.13: Perfil de la corriente para el caso $B = 2T$, $\theta = 45^\circ$ y $V = 0.09V$. (a) Oscilaciones autosostenidas de la corriente donde la frecuencia de oscilación es de 80GHz. (b) Perfil ampliado de la corriente.

En la figura 6.14 se muestran tres perfiles de oscilaciones para valores entre dos y cuatro teslas. En los rangos temporales mostrados en la figura 6.14 (b) y (c) (resultados numéricos correspondientes a los valores $B \geq 2T$), no se observa ningún período.

La dinámica de las ondas viajeras de densidad electrónica está ligada directamente con el ángulo que forma el campo magnético con el eje de crecimiento de la superred, con la intensidad magnética y con el voltaje aplicado. Veamos cómo la trayectoria que la onda seguirá a través de la muestra depende directamente del ángulo θ . Sean los gradientes del potencial eléctrico $\underline{E} = (\partial_x \Omega, \partial_z \Omega)$, donde como siempre se tiene en cuenta el cambio de variable 4.20. Cuando las intensidades magnéticas son $B \geq 2T$, los gradientes del potencial en la dirección del eje z son lo suficientemente altos para acumular sobre el dominio un canal de densidad de carga por donde acontecerá el transporte electrónico. Los extremos del canal deberán de coincidir con los puntos máximos del potencial eléctrico respecto la dirección z en los contactos: de las condiciones Dirichlet del potencial (5.44) y (5.45) se deduce que estos extremos quedan en el punto $(x, z) = (0, 0)$ para el cátodo y el $(x, z(\theta)) = (N, N \frac{l}{L_z} \tan \theta)$ para el ánodo respectivamente. Además, los resultados numéricos muestran que hay una acumulación de densidad electrónica en el extremos del canal (ver figura 6.16). En la figura 6.15 se muestran ondas de carga viajeras para intensidades magnéticas de $B = 2T$, $B = 3T$ y $B = 4T$ y con ángulos $\theta = 60^\circ$, $\theta = 50^\circ$ y $\theta = 45^\circ$ respectivamente. Cada una de las ondas, en forma de dipolo (ver 6.15 (f)), se nuclea en el primer tercio de la muestra y se dirige a la zona de acumulación de densidad electrónica del contacto colector definida por $(x, z(\theta)) = (N, N \frac{l}{L_z} \tan \theta)$.

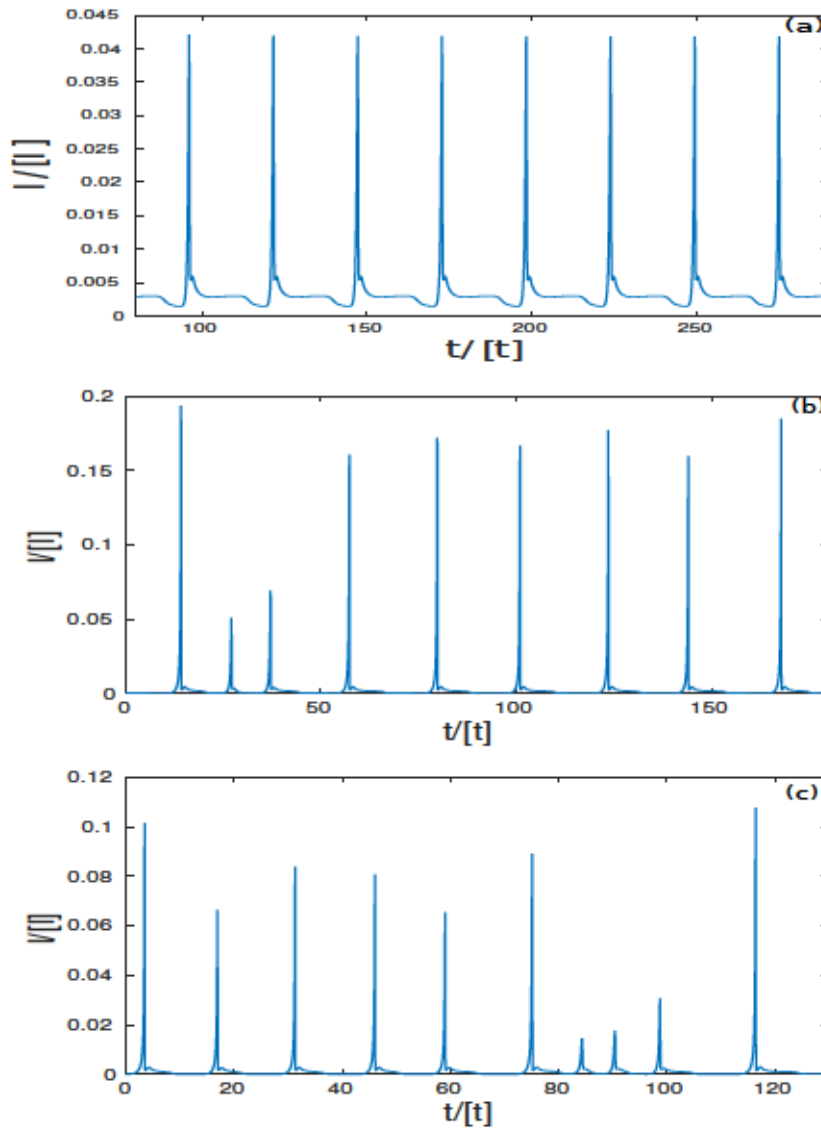


Figura 6.14: Oscilaciones de la corriente donde $\theta = 45^\circ$ y $V = 0.085\text{V}$ y con intensidades magnéticas (a) $B = 2\text{T}$, (b) $B = 3\text{T}$, (c) $B = 4\text{T}$.

En conclusión, a partir del modelo utilizado y con la elección de un método de integración numérica apropiado, ha sido posible observar de manera cualitativa una dependencia bidimensional de las densidades electrónicas de los parámetros intensidad e inclinación del campo magnético y voltaje.

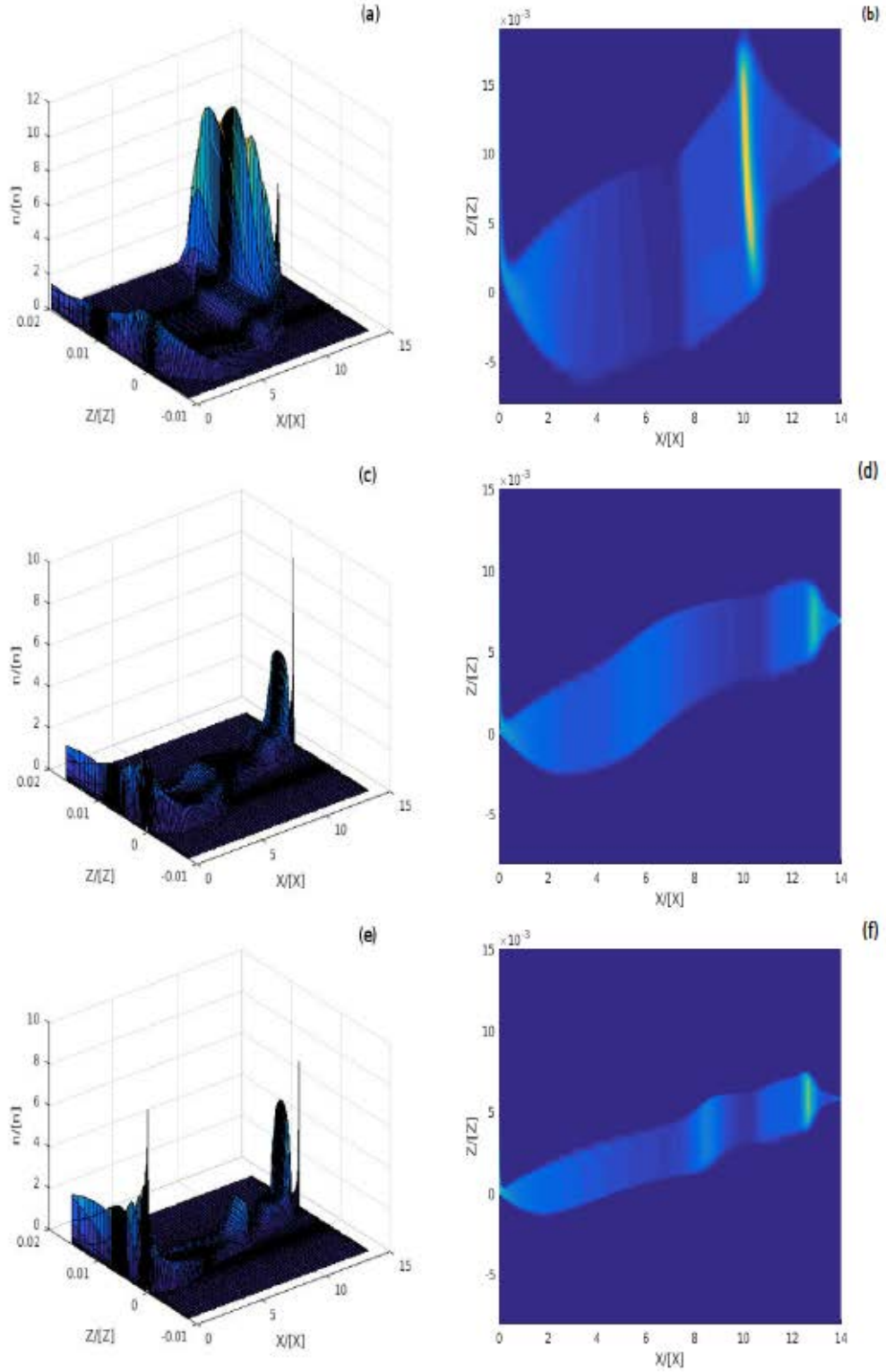


Figura 6.15: Ondas de densidad electrónica para (a), (b): $B = 2\text{T}$ y $\theta = 60^\circ$, (c), (d): $B = 3\text{T}$ y $\theta = 50^\circ$ y (e), (f): $B = 4\text{T}$ y $\theta = 45^\circ$. Se muestra la dependencia de la trayectoria de la onda del ángulo θ , la cual se dirige a la zona de acumulación de densidad en el colector. En los tres casos se observa como el ancho del canal y de la onda disminuye a medida que se incrementa la intensidad magnética B .

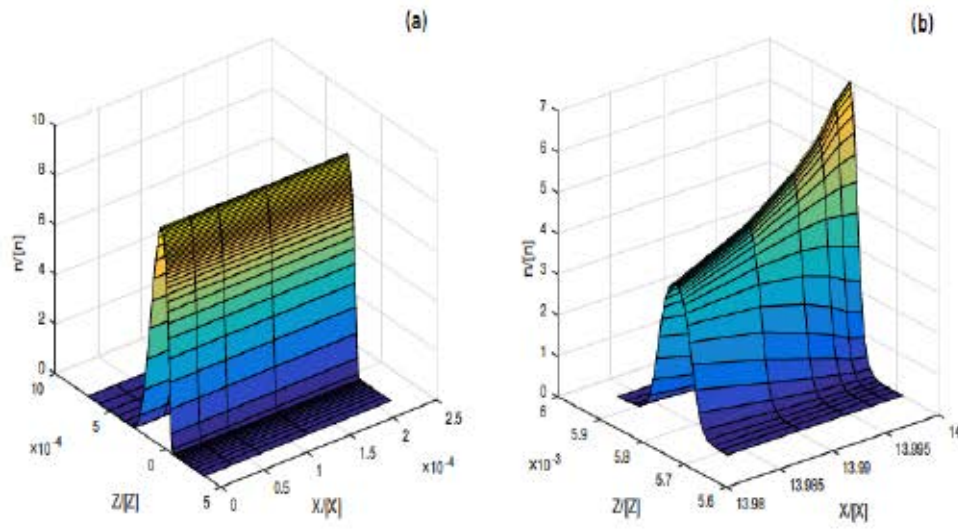


Figura 6.16: Densidad electrónica en (a) cátodo y (b) ánodo para $B = 4\text{T}$ y $\theta = 45^\circ$ correspondiente a la figura 6.15 (e).

Capítulo 7

Conclusiones Generales

Este último capítulo engloba las conclusiones generales y las posibles continuaciones del trabajo presentado en la memoria. En esta tesis hemos investigado mediante un modelo basado en una ecuación cinética semiclásica el transporte de carga electrónico en superredes fuertemente acopladas de tipo GaAs/InAs/AlAs bajo la influencia de campos magnéticos.

En la revisión bibliográfica realizada en esta memoria de los estudios concernientes a la dinámica electrónica de la superred semiconductora se describe un modelo teórico que consta de los siguientes puntos: de las ecuaciones semiclásicas del movimiento electrónico se construye una velocidad *drift* que considera el efecto de las colisiones de electrones fundamentado en el modelo unidimensional de Esaki-Tsu y se calculan soluciones de oscilaciones autosostenidas de la corriente basadas en una ecuación de continuidad de carga unidimensional.

En esta tesis doctoral se propone un modelo basado en una ecuación de transporte de Boltzmann con términos de colisiones del tipo BGK acoplada a la ecuación de Poisson para el potencial eléctrico. Considerando los términos de colisión y de campo eléctrico dominantes en la ecuación cinética, se desarrolla el método perturbativo de Chapman-Enskog para obtener una aproximación a la función de distribución electrónica y se establece la ecuación del momento bidimensional de tipo convectiva para la densidad electrónica. Este modelo contempla términos de colisiones más contundentes y considera una geometría bidimensional para la dinámica electrónica siendo ésta más acorde para la descripción del transporte electrónico en superredes bajo la acción de un campo magnético.

Para resolver el modelo bidimensional de ecuaciones acopladas se opta por un método de volúmenes finitos. Para comprobar el método numérico, primero se construye una configuración unidimensional del problema con-

siderando el campo magnético perpendicular al eje de crecimiento de la superred y posteriormente se extiende al caso bidimensional.

Los resultados numéricos para el transporte electrónico muestran una fuerte dependencia el dominio bidimensional. Una adecuada elección de las frecuencias de *scattering* tanto en el dominio de la superred como en el contacto inyector originan en las soluciones numéricas una propagación de ondas viajeras de densidad electrónica que conforman oscilaciones autosostenidas de la corriente. La dinámica y la geometría de estas ondas depende directamente de las intensidades del campo magnético, del ángulo que forma dicho campo con el eje de crecimiento de los pozos y del voltaje aplicado.

Para futuras líneas de trabajo se puede tener en cuenta un aumento del orden de precisión espacial del método numérico bidimensional considerando, por ejemplo, la implementación del esquema LUD, el cual, tal como se mostró en la implementación unidimensional en el Capítulo 5, es válido para ecuaciones de carácter puramente hiperbólico. Otro problema por explorar es la resolución numérica del modelo bidimensional considerando la expansión de la función de distribución a primer orden.

Appendix A

Adimensionalización de las ecuaciones

A.1 Ecuación de Poisson

En todo este apéndice, si una variable tiene el símbolo $\hat{}$ significa que la variable no tiene dimensiones. Además, si una variable aparece entre los símbolos $[\]$ significa que son las dimensiones físicas de dicha variable (estas dimensiones se pueden obtener de la tabla 5.1). De la ecuación de Poisson se llega a

$$\varepsilon \left[\frac{\partial^2(\hat{\Omega}[\Omega])}{\partial^2(\hat{x}[x])} + \frac{\partial^2(\hat{\Omega}[\Omega])}{\partial^2(\hat{z}[z])} \right] = e \left[\hat{n}[n] - N_D - \frac{\varepsilon B^2}{m} \right].$$

Teniendo en cuenta que $[n] = N_D + \frac{\varepsilon B^2}{m}$ obtenemos

$$\frac{\varepsilon[\Omega]}{e[x]^2[n]} \left[\frac{\partial^2 \hat{\Omega}}{\partial \hat{x}^2} + \left(\frac{[x]}{[z]} \right)^2 \frac{\partial^2 \hat{\Omega}}{\partial \hat{z}^2} \right] = \hat{n} - 1.$$

Definiendo

$$\varphi = \frac{\varepsilon[\Omega]}{e[x]^2[n]} = \frac{\varepsilon \hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}}{e^2 l^2 (N_D + \frac{\varepsilon B^2}{m})} \approx 0.097159,$$

donde se ha tenido en cuenta que $[\Omega] = [\mathcal{W}] = [F][x]$, finalmente se obtiene la expresión sin dimensiones de la ecuación de Poisson

$$\frac{\partial^2 \hat{\Omega}}{\partial \hat{x}^2} + \frac{l^2}{L_z^2} \frac{\partial^2 \hat{\Omega}}{\partial \hat{z}^2} = \frac{1}{\varphi} (\hat{n} - 1), \quad (\text{A.1})$$

donde

$$\left(\frac{[x]}{[z]}\right)^2 = \frac{l^2}{L_z^2} \approx (4.15 \times 10^{-4})^2 \approx 1.72 \times 10^{-7}.$$

A.2 Ecuación de transporte

La ecuación de transporte (4.87), verifica las siguientes relaciones con dimensiones

$$\frac{[e][n]}{[t]} \equiv \frac{[J_{nx}]}{[x]} \equiv \frac{J_{nz}}{z}$$

y teniendo en cuenta que

$$[J_{nx}] \equiv [e][n][v_x], \quad [J_{nz}] \equiv [e][n][v_z]$$

se verifica

$$\frac{e[n]}{[t]} \frac{\partial \hat{n}}{\partial \hat{t}} + \frac{[J_{nx}]}{[x]} \frac{\partial \hat{J}_{nx}}{\partial \hat{x}} + \frac{[J_{nz}]}{[z]} \frac{\partial \hat{J}_{nz}}{\partial \hat{z}} = 0.$$

Si multiplicamos por $\frac{[x]}{e[n][v_x]}$ obtenemos finalmente

$$\frac{\partial \hat{n}}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial \hat{J}_{nx}}{\partial \hat{x}} + \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{v_x} \frac{\partial \hat{J}_{nz}}{\partial \hat{z}} = 0. \quad (\text{A.2})$$

A.3 Ecuaciones de Ampère

De la ecuación $\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial x} \right) + J_{nx} = J_x$ resulta

$$\frac{\varepsilon[\Omega]}{[t][x]} \frac{\partial}{\partial \hat{t}} \left(\frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial \hat{x}} \right) + \hat{J}_{nx}[J_{nx}] = \hat{J}_x[J_x]$$

donde se ha tenido en cuenta que $\frac{\partial}{\partial \hat{t}} \left(\frac{\partial \hat{\mathcal{W}}}{\partial \hat{x}} \right) = \frac{\partial}{\partial \hat{t}} \left(\frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial \hat{x}} \right)$ y la definición Ω ,

ya que el término $\frac{\hbar B}{m} k_y \sin \theta$ no depende del tiempo y por consiguiente su derivada respecto t es cero. Utilizando $[J_x] = [J_{nx}]$, se obtiene finalmente

$$\varphi \frac{\partial}{\partial \hat{t}} \left(\frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial \hat{x}} \right) + \hat{J}_{nx} = \hat{J}_x.$$

Análogamente para las ecuaciones con dimensiones $\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial z} \right) + J_{nz} = J_z$, y tomando $[J_{nz}] = e[n][v_z] = [J_z]$, llegamos a que

$$\varphi \frac{l}{L_z} \frac{[v_x]}{v_z} \frac{\partial}{\partial \hat{t}} \left(\frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial \hat{z}} \right) + \hat{J}_{nz} = \hat{J}_z.$$

A.4 Ecuación de la divergencia nula

De $\nabla_{\underline{x}} \cdot \underline{J} = 0$ se llega a que

$$\frac{e[n][v_x]}{[x]} \frac{\partial \hat{J}_x}{\partial \hat{x}} + \frac{e[n][v_z]}{[z]} \frac{\partial \hat{J}_z}{\partial \hat{z}} = 0.$$

Multiplicando por $\frac{[x]}{e[n][v_x]}$, llegamos a la ecuación de la divergencia nula sin dimensiones

$$\frac{\partial \hat{J}_x}{\partial \hat{x}} + \frac{l}{L_z} \frac{[v_z]}{[v_x]} \frac{\partial \hat{J}_z}{\partial \hat{z}} = 0. \quad (\text{A.3})$$

A.5 Dominio de integración de las ecuaciones

El dominio de las ecuaciones, con dimensiones, es:

$$(x, z) \in [0, L] \times \left[-\frac{L_z}{2}, \frac{L_z}{2} \right].$$

Ya que $L = Nl$, obtenemos $x = L \Rightarrow \hat{x}[x] = Nl$, y entonces $\hat{x} = N$.

Análogamente, $z = -\frac{L_z}{2} \Rightarrow \hat{z}[z] = -\frac{L_z}{2} \Rightarrow \hat{z} = -\frac{1}{2}$. También $\hat{z} = \frac{1}{2}$ para el extremo superior del intervalo. Entonces, el dominio sin dimensiones es

$$(\hat{x}, \hat{z}) \in [0, N] \times \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right].$$

A.6 Condiciones de contorno

Partimos de

$$\Omega(0, z, t) = \mathcal{W}(0, z, t) - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2me} \Big|_{x=0} = 0 - \frac{eB^2}{2m} \cos^2(\theta) z^2 \Rightarrow \hat{\Omega}(0, z, t) = \frac{e\Omega(0, z, t)}{\hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}}.$$

Entonces

$$\hat{\Omega}(0, \hat{z}, \hat{t}) = -\frac{e^2 B^2 \cos^2(\theta) L_z^2}{2m\hbar\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}} z^2.$$

Por otra parte, $\mathcal{W}(L, z, t) = V$ (bias voltage), entonces

$$\begin{aligned}\Omega(L, z, t) &= \mathcal{W}(L, z, t) - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2me} \Big|_{x=L} = V - \frac{eB^2}{2m} (L \sin \theta - z \cos \theta)^2 \Rightarrow \\ \hat{\Omega}(\hat{x} = N, \hat{z}, \hat{t}) &= \frac{e\Omega(L, z, t)}{\hbar\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}},\end{aligned}$$

y obtenemos

$$\hat{\Omega}(N, \hat{z}, \hat{t}) = \frac{eV}{\hbar\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}} - \frac{e^2 B^2 L_z^2}{2m\hbar\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}} (N \frac{l}{L_z} \sin \theta - z \cos \theta)^2.$$

Las condiciones para las densidades de corriente x son

$$J_{nx} = \sigma F = \sigma \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial x} = \sigma \frac{\partial}{\partial x} \left[\Omega + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2me} \right] = \sigma \left[\frac{\partial \Omega}{\partial x} + \frac{eB^2}{m} \sin \theta (x \sin \theta - z \cos \theta) \right].$$

Cuando $x = 0$, obtenemos

$$\hat{J}_{nx}(\hat{x} = 0, \hat{z}, \hat{t}) = \frac{\sigma}{e[n][v_x]} \left[\frac{[\Omega]}{[x]} \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial \hat{x}}(0, \hat{z}, \hat{t}) - \frac{eB^2}{m} (\cos \theta \sin \theta) \hat{z} L_z \right].$$

Teniendo en cuenta que

$$\frac{\sigma}{e[n][v_x]} \frac{[\Omega]}{[x]} = \frac{\sigma 4\hbar^2 I_0 (\nu_e + \nu_p)}{e^2 l^2 \Delta I_1 [n]} = \frac{\sigma}{[\sigma]} = \hat{\sigma}$$

donde

$$[\sigma] = \frac{e^2 l^2 \Delta I_1 [n]}{4\hbar^2 I_0 (\nu_e + \nu_p)}.$$

Por otra parte

$$\frac{\sigma e B^2 L_z}{me[n][v_x]} = \frac{\hat{\sigma} [\sigma] B^2 L_z}{m[n][v_x]} = \hat{\sigma} \frac{e^2 l L_z B^2}{m\hbar\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}} = \hat{\sigma} \beta$$

siendo

$$\beta = \frac{e^2 l L_z B^2}{m\hbar\sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}}.$$

Finalmente, las condiciones de la densidad de corriente en $\hat{x} = 0$ y $\hat{x} = N$ son

$$\begin{aligned}\hat{J}_{nx}(\hat{x} = 0, \hat{z}, \hat{t}) &= \hat{\sigma} \left[\frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial \hat{x}}(0, \hat{z}, \hat{t}) - \beta \hat{z} \sin \theta \cos \theta \right] \\ \hat{J}_{nx}(\hat{x} = N, \hat{z}, \hat{t}) &= \hat{\sigma} \left[\frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial \hat{x}}(N, \hat{z}, \hat{t}) - \beta \sin \theta \left(\hat{z} \cos \theta - \frac{Nl}{L_z} \sin \theta \right) \right].\end{aligned}$$

Para $\hat{z} = \pm 1/2$ resulta

$$J_{nz}(x, -\frac{L_z}{2}, t) = J_{nz}(x, \frac{L_z}{2}, t) = 0 \Rightarrow \hat{J}_{nz}(\hat{x}, \hat{z} = -\frac{1}{2}, \hat{t}) = \hat{J}_{nz}(\hat{x}, \hat{z} = \frac{1}{2}, \hat{t}) = 0.$$

A.7 Relación constitutiva J_{nz}

Utilizando $\mathcal{V}_z = \frac{e}{m\nu_e} \frac{\partial \Omega}{\partial z}$ se tiene que $[\mathcal{V}_z] = \frac{\hbar \tau_e}{mL_z} = [v_z]$. Entonces

$$\hat{\mathcal{V}}_z = \partial_{\hat{z}} \hat{\Omega}.$$

Además, utilizando $\mathcal{Q}_x = \frac{el}{\hbar \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}} \frac{\partial \Omega}{\partial x}$, podemos deducir que $[\mathcal{Q}_x] = 1$.

Entonces

$$\hat{\mathcal{Q}}_x = \partial_{\hat{x}} \hat{\Omega}.$$

De $J_{nz}^{(0)} = en\mathcal{V}_z$ se llega a que

$$\hat{J}_{nz}^{(0)} e[n][v_z] = e[n] \hat{n} \hat{\mathcal{V}}_z[v_z],$$

entonces

$$\hat{J}_{nz}^{(0)} = \hat{n} \hat{\mathcal{V}}_z.$$

De (4.83) se llega a que

$$\begin{aligned}\hat{J}_{nz}^{(1)} e[n][v_z] &= \frac{el\Delta I_1}{2\hbar I_0 \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}} \left\{ \hat{\mathcal{V}}_z[v_z] \partial_{\hat{x}} \left(\frac{\hat{n} \hat{\mathcal{Q}}_x}{1 + \hat{\mathcal{Q}}_x^2} \right) \frac{[n]}{l} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} \partial_{\hat{x}} \left(\frac{\hat{n} \hat{\mathcal{Q}}_x \hat{\mathcal{V}}_z}{(1 + \hat{\mathcal{Q}}_x^2)^2} \right) \frac{[n][v_z]}{l} \right\} \\ &\quad - \frac{e}{\nu_e} \left[[n][v_z] \hat{n} \hat{\mathcal{V}}_z \partial_{\hat{z}} \hat{\mathcal{V}}_z \frac{[v_z]}{L_z} + \partial_{\hat{z}} (\hat{n} \hat{\mathcal{V}}_z^2) \frac{[n][v_z]^2}{L_z} \right] \\ &\quad - \frac{ek_B T}{m\nu_e} \partial_{\hat{z}} \hat{n} \frac{[n]}{L_z} - \frac{e^2 \hat{n} [n]}{m\nu_e^2} \frac{\hat{J}_z - \hat{J}_{nz}^{(0)}}{\varepsilon} [n] e[v_z].\end{aligned}$$

y finalmente

$$\begin{aligned} \hat{J}_{nz}^{(1)} = & \frac{\Delta I_1}{2\hbar I_0 \sqrt{\nu_e(\nu_e + \nu_p)}} \left\{ \hat{\mathcal{V}}_z \partial_{\hat{x}} \left(\frac{\hat{n} \hat{\mathcal{Q}}_x}{1 + \hat{\mathcal{Q}}_x^2} \right) - (1 + \tau_e^{-2}) \partial_{\hat{x}} \left(\frac{\hat{n} \hat{\mathcal{Q}}_x \hat{\mathcal{V}}_z}{(1 + \hat{\mathcal{Q}}_x^2)^2} \right) \right\} \\ & - \frac{[v_z]}{L_z \nu_e} \left[\hat{n} \hat{\mathcal{V}}_z \partial_{\hat{z}} \hat{\mathcal{V}}_z + \partial_{\hat{z}} (\hat{n} \hat{\mathcal{V}}_z^2) \right] - \frac{k_B T}{m \nu_e [v_z] L_z} \partial_{\hat{z}} \hat{n} - \frac{e^2 [n]}{m \nu_e^2 \varepsilon} \hat{n} \left(\hat{J}_z - \hat{J}_{nz}^{(0)} \right), \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} \delta_1 &= \frac{\Delta I_0}{2\hbar \nu_e \tau_e I_1} \approx 2.495, \quad \frac{\delta_1 I_1^2}{I_0^2} \approx 2.494892, \quad \frac{2\nu_e + \nu_p}{\nu_e + \nu_p} = (1 + \tau_e^{-2}), \\ \eta_1 &= \frac{[v_z]}{L_z \nu_e} = \frac{\hbar \tau_e}{m \nu_e L_z^2} \approx 5.514243 \times 10^{-5}, \quad \eta_2 = \frac{k_B T}{m \nu_e [v_z] L_z} = \frac{k_B T}{\hbar \nu_e \tau_e} \approx 0.096912, \\ \eta_3 &= \frac{e^2 [n]}{m \nu_e^2 \varepsilon} \approx 3295.47045, \end{aligned}$$

y

$$\hat{J}_{nz} = \hat{J}_{nz}^{(0)} + \hat{J}_{nz}^{(1)}.$$

A.8 Relación constitutiva J_{nx}

De $J_{nx}^{(0)} = \frac{e \Delta I_1 n}{2\hbar I_0 \tau_e} \frac{Q_x}{1 + Q_x^2}$ se llega a

$$\hat{J}_{nx}^{(0)} e[n][v_x] = \frac{e \Delta I_1 n}{2\hbar I_0 \tau_e} [n] \frac{\hat{\mathcal{Q}}_x}{1 + \hat{\mathcal{Q}}_x^2} \quad \text{donde} \quad [v_x] = \frac{\Delta I_1}{4\hbar I_0 \tau_e},$$

entonces

$$\hat{J}_{nx}^{(0)} = 2n \frac{\hat{\mathcal{Q}}_x}{1 + \hat{\mathcal{Q}}_x^2}.$$

Utilizaremos en toda la deducción que

$$\tau_e = \sqrt{1 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}, \quad \frac{2 + \frac{\nu_p}{\nu_e}}{1 + \frac{\nu_p}{\nu_e}} = \tau_e^{-2} + 1, \quad 2 + \frac{\nu_p}{\nu_e} = 1 + \tau_e^2, \quad 3 + 2\frac{\nu_p}{\nu_e} = 1 + 2\tau_e^2.$$

De (4.78) se deduce que

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_{nx}^{(1)} e[n][v_x] &= \frac{e\Delta l}{1 + \hat{Q}_x^2} \left\{ -\frac{\Delta l}{4\hbar} \left[\partial_{\hat{x}} \hat{n} \frac{[n]}{l} + \frac{2I_2}{I_0} \hat{Q}_x \partial_{\hat{x}} \frac{\hat{n} \hat{Q}_x}{1 + 4\hat{Q}_x^2} \frac{[n]}{l} - \frac{I_2}{I_0} \partial_{\hat{x}} \frac{\hat{n}}{1 + 4\hat{Q}_x^2} \frac{[n]}{l} \right] \right. \\
 &+ \frac{I_1}{I_0 \tau_e} \left[\hat{Q}_x \partial_{\hat{z}} \left(\frac{\hat{n} \hat{V}_z (\hat{Q}_x^2 - \tau_e^2)}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \frac{[n][v_z]}{L_z} - (1 + \tau_e^{-2}) \partial_{\hat{z}} \left(\frac{\hat{n} \hat{Q}_x \hat{V}_z}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \frac{[n][v_z]}{L_z} \right. \\
 &+ \frac{1 + \tau_e^2}{e} \frac{\hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \left[\partial_{\hat{x}} \left(2\hat{n} \frac{\hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \right) \frac{[v_x]}{l} + \partial_{\hat{z}} (\hat{n} \hat{V}_z) \frac{[v_z]}{L_z} \right] e[n] \\
 &\left. \left. - \hat{n}[n] \frac{e l [1 - (1 + 2\tau_e) \hat{Q}_x^2]}{\varepsilon \hbar \nu_e \tau_e (1 + \hat{Q}_x^2)^2} \left(\hat{J}_x - 2\hat{n} \frac{\hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \right) [n][v_x] e \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

Operando, desarrollando las derivadas en x y usando que $[v_x] = \frac{\Delta l I_1}{4\hbar \tau_e I_0}$ obtenemos

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_{nx}^{(1)} &= -\frac{I_0 \Delta}{2\hbar \nu_e \tau_e I_1 (1 + \hat{Q}_x^2)} \left[\partial_{\hat{x}} \hat{n} + \frac{2I_2}{I_0} \hat{Q}_x \partial_{\hat{x}} \hat{n} \frac{\hat{Q}_x}{1 + 4\hat{Q}_x^2} - \frac{I_2}{I_0} \partial_{\hat{x}} \hat{n} \frac{1}{1 + 4\hat{Q}_x^2} \right. \\
 &+ \left. \frac{2I_2}{I_0} \hat{Q}_x \hat{n} \partial_{\hat{x}} \hat{Q}_x \frac{1 - 4\hat{Q}_x^2}{(1 + 4\hat{Q}_x^2)^2} + \frac{I_2}{I_0} \hat{Q}_x \hat{n} \partial_{\hat{x}} \hat{Q}_x \frac{8}{(1 + 4\hat{Q}_x^2)^2} \right] \\
 &+ \frac{2}{\nu_e \tau_e^2 (1 + \hat{Q}_x^2)} \left\{ \hat{Q}_x \partial_{\hat{z}} \left(\frac{\hat{n} \hat{V}_z (\hat{Q}_x^2 - \tau_e^2)}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \frac{[v_z]}{L_z} - (1 + \tau_e^{-2}) \partial_{\hat{z}} \left(\frac{\hat{n} \hat{Q}_x \hat{V}_z}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \frac{[v_z]}{L_z} \right. \\
 &+ \left. (1 + \tau_e^2) \frac{\hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \left[\left(2\partial_{\hat{x}} \hat{n} \frac{\hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} + 2\hat{n} \partial_{\hat{x}} \hat{Q}_x \frac{1 - \hat{Q}_x^2}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \frac{[v_x]}{l} + \partial_{\hat{z}} (\hat{n} \hat{V}_z) \frac{[v_z]}{L_z} \right] \right. \\
 &\left. \left. - \hat{n}[n] \frac{e l [1 - (1 + 2\tau_e) \hat{Q}_x^2]}{\varepsilon \hbar \nu_e \tau_e (1 + \hat{Q}_x^2)^2} \left(\hat{J}_x - 2\hat{n} \frac{\hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \right) [v_x] e \right\}.
 \end{aligned}$$

Reagrupando los términos $\partial_x \hat{n}$ y $\hat{n} \partial_x \hat{Q}_x$ llegamos a

$$\begin{aligned} \hat{J}_{nx}^{(1)} = & -\delta_1 \left(1 - \frac{I_2}{I_0} \frac{1 - 2\hat{Q}_x^2}{1 + 4\hat{Q}_x^2} - \frac{2I_1^2(1 + \tau_e^{-2})}{I_0^2} \frac{\hat{Q}_x^2}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \frac{\partial_x n}{1 + \hat{Q}_x^2} \\ & - \delta_3 \left(\frac{I_2}{I_1} \frac{5 - 4\hat{Q}_x^2}{1 + 4\hat{Q}_x^2} - \frac{(1 + \tau_e^{-2})I_1}{I_0} \frac{1 - \hat{Q}_x^2}{(1 + \hat{Q}_x^2)^3} \right) \frac{n \hat{Q}_x \partial_x \hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \\ & + \frac{2}{\nu_e \tau_e^2} \frac{1}{(1 + \hat{Q}_x^2)} \left\{ \hat{Q}_x \partial_z \left(\frac{\hat{n} \hat{V}_z (\hat{Q}_x^2 - \tau_e^2)}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \frac{[v_z]}{L_z} - (1 + \tau_e^{-2}) \partial_z \left(\frac{\hat{n} \hat{Q}_x \hat{V}_z}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \frac{[v_z]}{L_z} \right. \\ & + (1 + \tau_e^2) \frac{\hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \left(\partial_z (\hat{n} \hat{V}_z) \frac{[v_z]}{L_z} \right) \\ & \left. - \hat{n}[n] \frac{e l}{\varepsilon \hbar \nu_e \tau_e} \frac{[1 - (1 + 2\tau_e) \hat{Q}_x^2]}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \left(\hat{J}_x - 2\hat{n} \frac{\hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \right) [v_x] e \right\}, \end{aligned}$$

donde

$$\delta_1 = \frac{\Delta I_0}{2\hbar \nu_e \tau_e I_1}, \quad \delta_3 = \frac{\Delta}{\hbar \nu_e \tau_e}.$$

Análogamente para ∂_z y reagrupando términos obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{J}_{nz}^{(1)} = & -\delta_1 \left(1 - \frac{I_2}{I_0} \frac{1 - 2\hat{Q}_x^2}{1 + 4\hat{Q}_x^2} - \frac{2I_1^2(1 + \tau_e^{-2})}{I_0^2} \frac{\hat{Q}_x^2}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \frac{\partial_z \hat{n}}{1 + \hat{Q}_x^2} \\ & - \delta_3 \left(\frac{I_2}{I_1} \frac{5 - 4\hat{Q}_x^2}{1 + 4\hat{Q}_x^2} - \frac{(1 + \tau_e^{-2})I_1}{I_0} \frac{1 - \hat{Q}_x^2}{(1 + \hat{Q}_x^2)^3} \right) \frac{\hat{n} \hat{Q}_x \partial_z \hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \\ & + \frac{\delta_4}{1 + \hat{Q}_x^2} \left\{ \left(\tau_e^2 - \frac{2 + \tau_e^2 + \tau_e^{-2}}{1 + \hat{Q}_x^2} \right) \frac{\hat{Q}_x \hat{V}_z \partial_z \hat{n}}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} + 2\hat{n} \left[\frac{(\tau_e^2 - 1) \hat{Q}_x \partial_z \hat{V}_z}{1 + \hat{Q}_x^2} \right. \right. \\ & \left. \left. + \hat{Q}_x \partial_z \left(\frac{\hat{V}_z (\hat{Q}_x^2 - \tau_e^2)}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) - (1 + \tau_e^{-2}) \partial_z \left(\frac{\hat{V}_z \hat{Q}_x}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \right] \right\} \\ & - \frac{2}{\nu_e \tau_e^2} \frac{1}{(1 + \hat{Q}_x^2)} \left[\hat{n}[n] \frac{e l}{\varepsilon \hbar \nu_e \tau_e} \frac{[1 - (1 + 2\tau_e) \hat{Q}_x^2]}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \left(\hat{J}_x - 2\hat{n} \frac{\hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \right) [v_x] e \right], \end{aligned}$$

donde

$$\delta_4 = \frac{[v_z]}{L_z(\nu_e + \nu_p)} = \frac{\hbar}{m \nu_e \tau_e L_z^2}.$$

Finalmente,

$$\begin{aligned}
\hat{j}_{nx}^{(1)} = & -\delta_1 \left(1 - \frac{I_2}{I_0} \frac{1 - 2\hat{Q}_x^2}{1 + 4\hat{Q}_x^2} - \frac{2I_1^2(1 + \tau_e^{-2})}{I_0^2} \frac{\hat{Q}_x^2}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \frac{\partial_{\hat{x}} \hat{n}}{1 + \hat{Q}_x^2} \\
& - \delta_2 \frac{1 - (1 + 2\tau_e^2)\hat{Q}_x^2}{(1 + \hat{Q}_x^2)^3} \hat{n} \left(\hat{j}_x - \frac{2\hat{n}\hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \right) \\
& - \delta_3 \left(\frac{I_2}{I_1} \frac{5 - 4\hat{Q}_x^2}{1 + 4\hat{Q}_x^2} - \frac{(1 + \tau_e^{-2})I_1}{I_0} \frac{1 - \hat{Q}_x^2}{(1 + \hat{Q}_x^2)^3} \right) \frac{\hat{n}\hat{Q}_x\partial_{\hat{x}}\hat{Q}_x}{1 + \hat{Q}_x^2} \\
& + \frac{\delta_4}{1 + \hat{Q}_x^2} \left\{ \left(\tau_e^2 - \frac{2 + \tau_e^2 + \tau_e^{-2}}{1 + \hat{Q}_x^2} \right) \frac{\hat{Q}_x\hat{V}_z\partial_{\hat{z}}\hat{n}}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} + 2\hat{n} \left[\frac{(\tau_e^2 - 1)\hat{Q}_x\partial_{\hat{z}}\hat{V}_z}{1 + \hat{Q}_x^2} \right. \right. \\
& \left. \left. + \hat{Q}_x\partial_{\hat{z}} \left(\frac{\hat{V}_z(\hat{Q}_x^2 - \tau_e^2)}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) - (1 + \tau_e^{-2})\partial_{\hat{z}} \left(\frac{\hat{V}_z\hat{Q}_x}{(1 + \hat{Q}_x^2)^2} \right) \right] \right\},
\end{aligned}$$

donde

$$\delta_2 = \frac{e^2[n]\Delta l^2 I_1}{2\hbar^2 \nu_e^2 \tau_e^4 \varepsilon I_0},$$

y

$$\hat{J}_{nx} = \hat{J}_{nx}^{(0)} + \hat{J}_{nx}^{(1)}.$$

Consideramos ahora la adimensionalización de la densidad corriente total cuando el ángulo entre el campo magnético B y el eje x es $\theta = \pi/2$, sección (5.1). En esta geometría, la densidad de corriente sólo depende de la dirección x . Partiendo de la ecuación para la densidad de corriente total [36]

$$J_{\text{total}}(t) = \frac{1}{L} \int_0^L J_{nx}(x, t) dx, \quad (\text{A.4})$$

y considerando $[J_{\text{total}}] = [J_{nx}]$, $L = Nl$, se llega a que

$$\hat{J}_{\text{total}}(t) = \frac{1}{N} \int_0^N \hat{J}_{nx}(x, t) d\hat{x}. \quad (\text{A.5})$$

Bibliografía

- [1] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. Krook, "A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems," *Phys. Rev.*, vol. 94, pp. 511–525, May 1954.
- [2] L. L. Bonilla, R. Escobedo, and A. Perales, "Generalized drift-diffusion model for miniband superlattices," *Phys. Rev. B*, vol. 68, p. 241304, Dec 2003.
- [3] H. T. Grahn, *Introduction to Semiconductor Physics*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 1999.
- [4] M. S. Tyagi, *Introduction to Semiconductor Materials and Devices*. John Wiley and Sons, New York, 1991.
- [5] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. Harcourt, Inc, New York, 1976.
- [6] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley and Sons, Inc, New York, 1995.
- [7] L. L. Bonilla and H. T. Grahn, "Non-linear dynamics of semiconductor superlattices," *Rep. Prog. Phys.*, vol. 68, pp. 577–683, Feb 2005.
- [8] H. Kroemer, "*Gunn effect-bulk instabilities*" in *Topics in Solid State and Quantum Electronics*. W.D. Hershberger, Ed., John Wiley, New York, 1972, pp. 20-98.
- [9] T. M. Fromhold, A. A. Krokhin, S. Bujkiewicz, P. B. Wilkinson, D. Fowler, A. Patané, L. Eaves, D. P. A. Hardwick, A. G. Balanov, M. T. Greenaway, and A. Henning, "*Using Stochastic Webs to Control the Quantum Transport of Electrons in Semiconductor Superlattices*" in *Hamiltonian Chaos Beyond the KAM Theory*. A.B.J. Luo and V. Afraimovich, Eds., Springer Science and Business Media, New York, 2011, pp. 225-249.

- [10] D. Fowler, D. P. A. Hardwick, A. Patanè, M. T. Greenaway, A. G. Balanov, T. M. Fromhold, L. Eaves, M. Henini, N. Kozlova, J. Freudenberger, and N. Mori, "Magnetic-field-induced miniband conduction in semiconductor superlattices," *Phys. Rev. B*, vol. 76, p. 245303, Dec 2007.
- [11] M. T. Greenaway, A. G. Balanov, E. Schöll, and T. M. Fromhold, "Controlling and enhancing terahertz collective electron dynamics in superlattices by chaos-assisted miniband transport," *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 205318, Nov 2009.
- [12] L. L. Bonilla, M. Álvaro, and M. Carretero, "Theory of spatially inhomogeneous bloch oscillations in semiconductor superlattices," *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 155316, Oct 2011.
- [13] M. Álvaro, M. Carretero, and L. L. Bonilla, "Numerical method for hydrodynamic modulation equations describing bloch oscillations in semiconductor superlattices," *J. Comput. Phys.*, vol. 231, pp. 4499 – 4514, May 2012.
- [14] L. L. Bonilla, M. Álvaro, and M. Carretero, "Spatially confined bloch oscillations in semiconductor superlattices," *EPL Europhys. Lett.*, vol. 95, p. 47001, Aug 2011.
- [15] C. Zener, "A theory of the electrical breakdown of solid dielectrics," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, vol. 145, no. 855, pp. 523–529, 1934.
- [16] J. Feldmann, K. Leo, J. Shah, D. A. B. Miller, J. E. Cunningham, T. Meier, G. von Plessen, A. Schulze, P. Thomas, and S. Schmitt-Rink, "Optical investigation of bloch oscillations in a semiconductor superlattice," *Phys. Rev. B*, vol. 46, pp. 7252–7255, Sep 1992.
- [17] T. M. Fromhold, A. A. Krokhin, C. R. Tench, S. Bujkiewicz, P. B. Wilkinson, F. W. Sheard, and L. Eaves, "Effects of stochastic webs on chaotic electron transport in semiconductor superlattices," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 87, p. 046803, Jul 2001.
- [18] L. Esaki and R. Tsu, "Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors," *IBM J. Res. Dev.*, vol. 14, pp. 61–65, Jan 1970.
- [19] A. Patanè, D. Sherwood, L. Eaves, T. M. Fromhold, M. Henini, P. C. Main, and G. Hill, "Tailoring the electronic properties of gaas/alas superlattices by inas layer insertions," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 81, Jul 2002.

- [20] T. M. Fromhold, A. Patanè, S. Bujkiewicz, P. B. Wilkinson, D. Fowler, D. Sherwood, S. P. Stapleton, A. A. Krokhin, L. Eaves, M. Henini, N. S. Sankeshwar, and F. W. Sheard, "Chaotic electron diffusion through stochastic webs enhances current flow in superlattices," *Nature*, vol. 428, pp. 726–730, Apr 2004.
- [21] D. Fowler, A. Patanè, A. Ignatov, L. Eaves, M. Henini, N. Mori, D. K. Maude, and R. Airey, "Current flow and energy dissipation in low-dimensional semiconductor superlattices," *App. Phys. Lett.*, vol. 88, Feb 2006.
- [22] A. Patanè and M. Fromhold, "Novel regimes of electron dynamics in superlattices," *Phil. Trans. R. Soc. A*, vol. 364, pp. 3477–3492, Dec 2006.
- [23] D. P. A. Hardwick, *Quantum and semiclassical calculations of electron transport through a stochastic system*. PhD thesis, University of Nottingham, United Kingdom, 2007.
- [24] A. O. Sel'skii, A. A. Koronovskii, A. E. Hramov, O. I. Moskalenko, K. N. Alekseev, M. T. Greenaway, F. Wang, T. M. Fromhold, A. V. Shorokhov, N. N. Khvastunov, and A. G. Balanov, "Effect of temperature on resonant electron transport through stochastic conduction channels in superlattices," *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 235311, Dec 2011.
- [25] A. G. Balanov, M. T. Greenaway, A. A. Koronovskii, O. I. Moskalenko, A. O. Sel'skii, T. M. Fromhold, and A. E. Khramov, "The effect of temperature on the nonlinear dynamics of charge in a semiconductor superlattice in the presence of a magnetic field," *J. Exp. Theor. Phys.*, vol. 114, pp. 836–840, Jun 2012.
- [26] N. Alexeeva, M. T. Greenaway, A. G. Balanov, O. Makarovskiy, A. Patanè, M. B. Gaifullin, F. Kusmartsev, and T. M. Fromhold, "Controlling high-frequency collective electron dynamics via single-particle complexity," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, p. 024102, Jul 2012.
- [27] M. T. Greenaway, A. G. Balanov, and T. M. Fromhold, "Controlling Charge Domain Dynamics in Superlattices" in *Nonlinear Laser Dynamics: From Quantum Dots to Cryptography*. K. Lüdge, Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2012, pp. 111–132.
- [28] A. O. Sel'skii, A. A. Koronovskii, O. I. Moskalenko, A. E. Hramov, T. M. Fromhold, M. T. Greenaway, and A. G. Balanov, "Studying transitions

- between different regimes of current oscillations generated in a semiconductor superlattice in the presence of a tilted magnetic field at various temperatures,” *Tech. Phys. Lett.*, vol. 41, pp. 768–770, Sep 2015.
- [29] F. Takens, *Lecture Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1981.
- [30] A. Y. Cho and J. R. Arthur, “Molecular beam epitaxy,” *Prog. Sol. State Ch.*, vol. 10, pp. 157–191, 1975.
- [31] A. Sibille, “Miniband Transport” in *Semiconductor Superlattices: Growth and Electronic Properties*. Grahn, H. T. Ed., World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 1995, pp. 29–94.
- [32] H. Struchtrup, *Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows: Approximation Methods in Kinetic Theory*. Springer-Verlag, Berlin, 2006.
- [33] J. H. Ferziger and H. G. Kaper, *Mathematical theory of transport processes in gases*. North-Holland Pub. Co., Amsterdam, 1972.
- [34] L. L. Bonilla and S. W. Teitsworth, *Nonlinear Wave Methods for Charge Transport*. Wiley, Weinheim, 2010.
- [35] S. A. Ktitorov, G. S. Simin, and V. Y. Sindalovskii, “Bragg reflections and the highfrequency conductivity of an electronic solid-state plasma,” *Fiz. Tverd. Tela*, vol. 13, pp. 2230–2233, 1972.
- [36] E. Cebrián, L. L. Bonilla, and A. Carpio, “Self-sustained current oscillations in the kinetic theory of semiconductor superlattices,” *J. Comp. Phys.*, vol. 228, pp. 7689 – 7705, Nov 2009.
- [37] M. Álvaro, E. Cebrián, M. Carretero, and L. L. Bonilla, “Numerical methods for kinetic equations in semiconductor superlattices,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 184, pp. 720 – 731, Mar 2013.
- [38] A. A. Ignatov and V. I. Shashkin, “Bloch oscillations of electrons and instability of space-charge waves in semiconductor superlattices,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, vol. 93, pp. 935–943, Sept 1987.
- [39] A. A. Ignatov, E. P. Dodin, and V. I. Shashkin, “Transient response theory of semiconductor superlattices: connection with bloch oscillations,” *Mod. Phys. Lett. B*, vol. 05, pp. 1087–1094, Jul 1991.
- [40] A. Perales, *Dinámica electrónica en superredes semiconductoras*. PhD thesis, Universidad Carlos III de Madrid, España, 2004.

- [41] L. L. Bonilla and M. Carretero, *Perturbaciones Singulares*. Copy Red S.A., Madrid, 2009.
- [42] L. L. Bonilla, "Chapman-enskog method and synchronization of globally coupled oscillators," *Phys. Rev. E*, vol. 62, pp. 4862–4868, Oct 2000.
- [43] R. Escobedo, *Estudio numérico y asintótico del efecto Gunn en varias dimensiones descrito por el modelo de Kroemer de convección-difusión*. PhD thesis, Universidad Carlos III de Madrid, España, 2001.
- [44] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method*. Pearson Education Limited, Harlow, 2007.
- [45] H. Lomax, T. H. Pulliam, and D. W. Zingg, *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2001.
- [46] J. H. Ferziger and M. Peric, *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, New York, 2002.
- [47] T. Cebeci, J. P. Shao, F. Kafyeke, and E. Laurendeau, *Computational Fluid Dynamics for Engineers*. Horizons Publishing Inc., Long Beach, 2005.
- [48] S. C. Chapra and R. P. Canale, *Numerical Methods for Engineers*. McGraw-Hill Education, New York, 2015.
- [49] R. J. LeVeque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. The Press Syndicate of the University of Cambridge, Cambridge, 2002.
- [50] A. Carpio, P. Hernando, and M. Kindelan, "Numerical study of hyperbolic equations with integral constraints arising in semiconductor theory," *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 39, pp. 168–191, Feb 2002.
- [51] K. A. Hoffman and S. T. Chiang, *Computational Fluid Dynamics Volume I*. Engineering Education System, Wichita, 2000.
- [52] B. Fornberg, "Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids," *Math. Comput.*, vol. 51, no. 184, pp. 699–706, 1988.

